



TITLE:

レーザ誘起蛍光法による希薄気体
流れの温度・速度計測に関する研
究(Dissertation_全文)

AUTHOR(S):

平井, 悦郎

CITATION:

平井, 悦郎. レーザ誘起蛍光法による希薄気体流れの温度・速度計測に
関する研究. 京都大学, 1997, 博士(工学)

ISSUE DATE:

1997-03-24

URL:

<https://doi.org/10.11501/3123593>

RIGHT:

②
レーザ誘起蛍光法による

希薄気体流れの温度・速度計測に関する研究

平井悦郎

目 次

学位論文「レーザ誘起蛍光法による希薄気体流れの温度・速度に関する研究」

第1章 緒 言	1
1.1 緒 言	2
1.2 工業上の意義	4
1.2.1 Zn蒸着めっき鋼板製造設備	4
1.2.2 本論文との関連性	8
1.3 希薄気体流れの計測法の現況と本研究の位置づけ	9
1.3.1 計測法の種類と適用域	9
1.3.2 レーザ誘起蛍光法の基本原理	10
1.3.3 I_2 -LIF法の位置づけ	15
1.3.4 O_2 -LIPF法の位置づけ	17
1.4 本論文の内容	20
第2章 O_2 -LIPFによる温度測定理論	21
2.1 緒 言	22
2.2 O_2 -LIPFの理論	23
2.2.1 シューマン・ルンゲ・バンドのスペクトルシミュレーション	23
2.2.1.1 酸素分子の一般的な特徴	23
2.2.1.2 $^3\Sigma^-3\Sigma$ 遷移の特徴	26
2.2.1.3 シューマン・ルンゲ・バンドのスペクトル計算式	28
2.2.1.4 計算コード	37
2.2.2 O_2 -LIPFの使用圧力域	40
2.3 シューマン・ルンゲ・バンドのスペクトルシミュレーション結果	44
2.3.1 計算コードの精度の確認	44
2.3.2 振動・回転温度平衡の場合における シューマン・ルンゲ・バンドの全体的特徴	48
2.3.3 振動・回転温度非平衡の場合における シューマン・ルンゲ・バンドの全体的特徴	51

2.3.4	温度測定を行う為の O_2 -LIPF用レーザ波長	54
2.3.5	温度領域別にみたArF*エキシマレーザ波長域の回転スペクトル	55
2.3.5.1	振動・回転温度平衡の気体の場合	55
2.3.5.2	振動・回転温度非平衡の気体の場合	59
2.3.5.3	温度測定において重要な遷移バンド	66
2.4	結 言	68
第3章	O_2 -LIPFによる温度測定実験	69
3.1	緒 言	70
3.2	実験で得られるスペクトル形状の特徴	72
3.2.1	前期解離線幅の効果	72
3.2.2	レーザ掃引波長ステップ幅の効果	72
3.2.3	実験で得られるスペクトル形状の予測	76
3.2.4	$T_{vib} \approx 1000K$ の軸対称自由噴流測定における回転スペクトル	78
3.3	O_2 -LIPFによる軸対象自由噴流の回転温度測定	80
3.4	希薄気体中においた固体表面近傍の回転温度測定	92
3.5	結 言	100
第4章	I_2 -LIF による流速測定理論	102
4.1	緒 言	103
4.2	I_2 -LIF の理論	105
4.2.1	速度測定の原理	105
4.2.2	I_2 のB-Xバンドの回転スペクトル・シミュレーション	106
4.2.3	超微細構造スペクトル・シミュレーション	111
4.3	スペクトル・シミュレーション結果	115
4.3.1	B-Xバンドの回転スペクトル	115
4.3.2	P13-R18ブランチの超微細構造	119
4.3.3	スペクトル形状の計算結果	122
4.3.4	スペクトル形状のみかけのピーク点シフト	135
4.4	結 言	136

第5章	I_2 -LIF による流速測定実験	137
5.1	緒 言	138
5.2	自由噴流の一般的事項	140
5.3	I_2 -LIF による流れの可視化	141
5.4	I_2 -LIF による自由噴流流速測定	148
5.5	シールギャップ流速の理論	151
5.6	I_2 -LIF による真空シール装置ロール間の流速測定	158
5.7	結 言	160

第6章	結 言	161
-----	-----	-----

謝 辞	165
図表リスト	166
記号・添字	172
参考文献	176

Appendix

Appendix 1	フランク・コンドン因子の理論的計算法	A-2
Appendix 2	超微細構造の強度計算式の導出	A-9
Appendix 3	O_2 シューマン・ルンゲ・バンドのシミュレーションコード	A-11
Appendix 4	ArF*エキシマレーザ波長に含まれる O_2 シューマン・ルンゲ・バンド のブランチリスト	A-22
Appendix 5	O_2 の $X^3\Sigma_g^-$ 及び $B^3\Sigma_u^-$ の振動・回転準位	A-36
Appendix 6	I_2 のB-Xバンド・シミュレーションコード	A-47
Appendix 7	I_2 のB-Xバンドにおけるバンド位置	A-60
Appendix 8	I_2 のハミルトニアン固有値計算コード	A-70

第 1 章 緒 言

1.1 緒 言

希薄気体力学分野は、従来宇宙関連の研究と共に発展してきたが、近年はさらにすそ野を広げ、各種先端技術、例えば、

- (1) PVD(物理的蒸着法)、CVD(化学的蒸着法)、MBE(分子線エピタキシー法)、スパッタリングやプラズマCVDなどの薄膜製作に係わる各種マテリアル・プロセッシング
- (2) 分子・原子オーダーの加工に代表されるマイクロマシン・テクノロジー
- (3) クリーンで高効率な真空環境の設計技術
- (4) 航空宇宙における飛翔体の熱空力とエロージョンに対する信頼設計
- (5) スライダヘッドなどにおけるナノ・スケールの熱流体技術

等における生産性や機能・性能の向上を目差す研究によっても著しく進展しつつある。

筆者はこれまでZn蒸着めっき鋼板製造設備の開発^[B1]あるいはAl蒸着めっきプラスチックフィルム製造設備の開発^[B2]に従事し、成膜蒸着プロセスについて『希薄流体力学における移動現象』の観点から研究を進めて来た。ここで云う成膜蒸着プロセスとは真空中において被蒸着物質を何らかの形で蒸発させて蒸気とし、所定の表面へと蒸気を誘導して膜を形成させるまでの移動現象全体を意味しており、広い意味での流れ及び熱の研究分野に属している。しかし、ここでは従来の連続流域における流れや熱の移動現象に関する知識のみでは必ずしも十分ではない。この理由は、移動現象が連続流の問題からはずれ、すべり流、中間流、分子流の問題へと移行するにつれて、連続体としてのバルクな流体塊としての運動ではなく、原子・分子そのものの性質に由来する現象が姿を見せはじめるからである。

成膜蒸着プロセスに見られる希薄な流れ現象では、真空中での熔融金属の蒸発量予測あるいは表面上の蒸気の凝縮(成膜)量予測と云う一見単純で基本的な問題ですら、物理現象を議論しないまま、実験式があればそれを十分吟味することなく設計に応用して満足するのが実態である。蒸発・凝縮については近年ボルツマン方程式に基づく理論解析が展開されて理解が進みつつあるが^{[B3]~[B6]}、実験的な検討には十分進展していない。

成膜蒸着プロセスに関する研究が長年現象論的進展をみせなかった事については理由がある。すなわち、第1に、成膜現象は近年のコンピュータ関連分野の急激な成長とともに工業的に重要視され始めた分野であるために歴史が浅い。第2に希薄気体(蒸気)を直接測定する手段がほとんどなく、近年のレーザの発達によって始めて測定が出来るようになって来た。第3に成膜蒸着プロセスには常に「表面」が伴っており、単純な気相のみの取り扱いでは十分ではない。表面はそれが固体、液体にかかわらず原子・分子が密につまって運動している部分であり、固体物理、液体物理などの物性論の知見も含めながら希薄気体力学を適用する

と云う境界領域であるという点が問題を複雑化しており、取り扱いが困難であった。

本論文では、以上の観点を踏まえて広い意味での希薄気体力学、言い換えれば、分子・原子の微視的視点から現象にアプローチする学問分野、が前掲の例に代表される各種問題解決に共通的に有力な手法となるとの認識^[C1]に立ち、希薄気体流れの非接触測定法の中からレーザー誘起蛍光法(Laser-Induced Fluorescence:本論文ではLIF法と云う)を取り上げ、 O_2 分子を用いた温度測定(O_2 -LIPF法:Laser-Induced Predissociative Fluorescence)、及び、 I_2 分子を用いた速度測定(I_2 -LIF法)に関して研究を進めて来たので、その成果を取り纏めて報告する。

測定の対象は原子・分子であるが故に、原子・分子の量子力学的性質を詳細に吟味し、そこから理論的に得られる量子力学上の諸性質を巨視的な工学上の諸量(本論文では温度・速度)と、如何なる形で結びつけることが出来るかを理論的、実験的に検討することが、本論文の課題である。

1.2 工業上の意義

本節では筆者が従事してきた蒸着装置の開発内容と本論文の課題との関連性について述べる。

1.2.1 Zn蒸着めっき鋼板製造設備^[B1]

(1) 設備の概要

亜鉛めっき鋼板の製造法には、電気亜鉛めっき法と熔融亜鉛めっき法が広く普及している。しかし、それぞれの方法には、めっき性状ならびに製品コストに関して一長一短がある。このため、筆者らのグループでは生産性の増大、コストの低減、亜鉛目付量の多様化を目的として、真空蒸着亜鉛めっき鋼板製造ラインを開発した。

開発された連続式真空蒸着亜鉛めっき鋼板製造ラインのライン構成および仕様を図1.1及び表1.1に示す。このラインの特徴は、大気圧から真空室へ鋼板を連続搬送出来る点にあり、連続真空シール装置及び蒸着室の設計に希薄気体力学上の知見が応用されている。

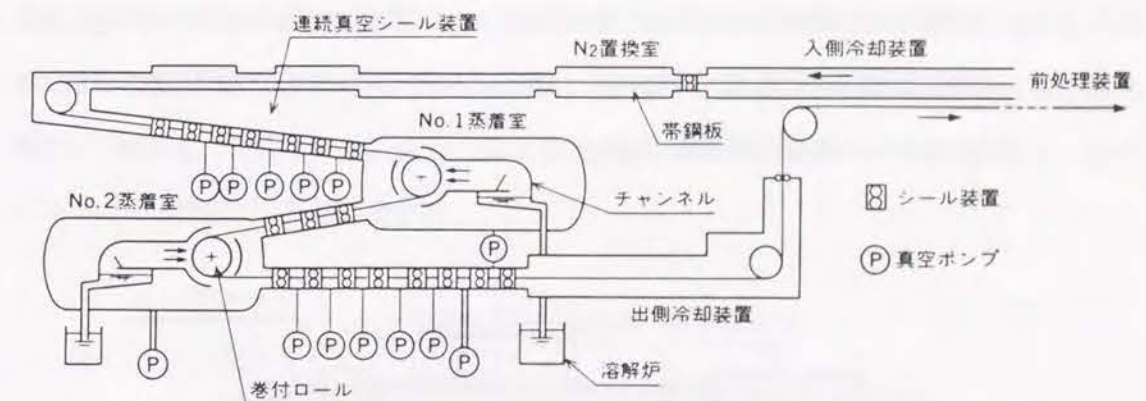


図1.1 真空蒸着亜鉛めっきライン構成

表1.1 ライン仕様

板厚	0.3 ~ 1.2 mm
板幅	760 ~ 1250 mm
最大コイル重量	25000 kg
最高ライン速度	200 m/min
最大処理量	47.7 t/h
最大蒸発量 No.1 蒸着室	335 kg/h
No.2 蒸着室	500 kg/h

(2) 連続真空シール装置

連続真空蒸着めっき鋼板製造ラインでは鋼板を外気から蒸着室まで搬送する。その搬送過程において大気圧側から蒸着室側への気体の洩れ込みがある。洩れ込む気体が蒸着室に到達しないよう排気するために、蒸着室までを適当な数の真空室に分割し、各真空室に真空ポンプを接続する差動排気システムと、真空室間の通過流量を少なくするための真空シール装置を併用している。この組み合わせ装置により、鋼板を大気圧→真空→大気圧の順に異なる圧力環境の中を搬送する。

(a) 差動排気システム

鋼板入口（図1.1左上）からNo.1蒸着室までを5つの室に、またNo.2蒸着室から鋼板出口（図1.1右下）までを6つの室に分割し、真空ポンプで排気する構成となっている。各室の真空ポンプの排気口は、高圧側の隣接室の真空ポンプ吸気側に接続され、差動排気システムを構成している。このような差動排気システムを構成することによって真空排気ポンプ動力を低減することが可能となる。

(b) 真空シール装置

差動排気システム内の各真空室は真空シール装置によって仕切られている。真空シール装置は回転するシールロールと固定のシールバーの2つから構成されている。図1.2にシール装置の構造を示す。

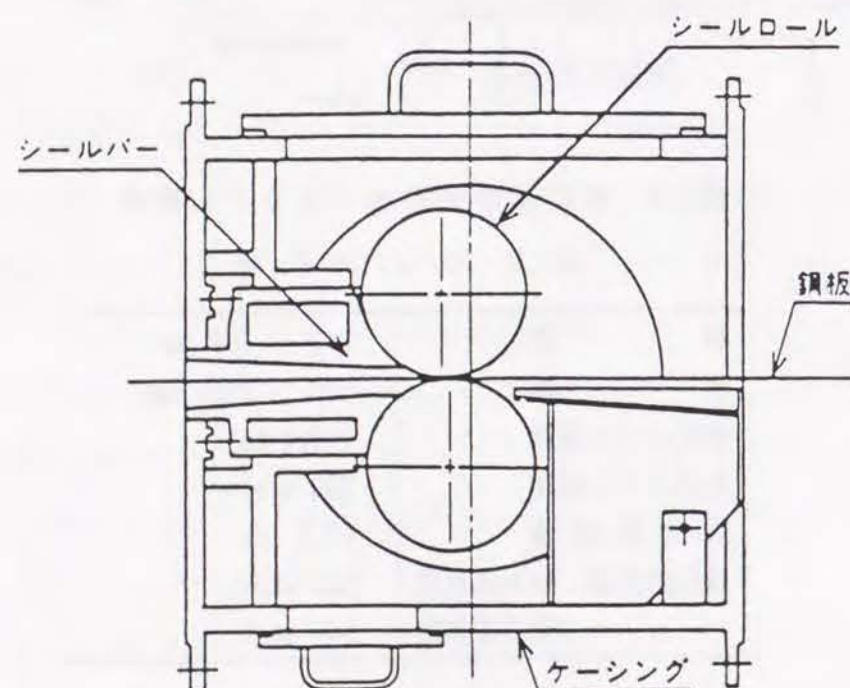


図1.2 真空シール装置

2本のシールロールは鋼板を両側から挟んでいるため、鋼板が通過する中央部ではシールロール間のすきまが零である。鋼板が存在しない両端部の領域では、鋼板板厚分(0.3mm~1.2mm)のすきまがあり、「二円筒間流路」を構成している。幅の狭い鋼板が通過する場合は、両端にそれぞれ300mm程度のすき間を持つ領域が出来る。また、シールバーとシールロールとの間には、相互の接触を避ける目的で間隔0.4~0.7mmのすき間があり、「平行平板間流路」に近い流路を構成している。シールロール及びシールバーは亜鉛蒸気が凝縮しないように、約500℃に高温均熱保持されている。

(c) 連続真空シール装置の工業上の問題点

真空シール装置のシール部を流れる気体は遷音速域の伝熱を伴う希薄気体流れであり、流れ現象（圧縮性粘性流）を解明し、シール部の洩れ流量を最小限にするための技術が求められている。本論文第5章において、二円筒間流路における流速測定について論述する。

(3) 蒸着室

蒸着室の構造は、図1.3に示すように、蒸発槽、チャンネル、鋼板を巻付けている加熱型巻付ロールから構成されている。亜鉛は大気中にある溶解炉によってあらかじめ溶解され、大気圧と蒸着室の圧力差によって、吸上管を通して蒸発槽に供給される。蒸発槽内の亜鉛は、電気ヒータにより上部より加熱され蒸発して、チャンネルを通り、巻付ロール上の鋼板の片面に蒸着する。

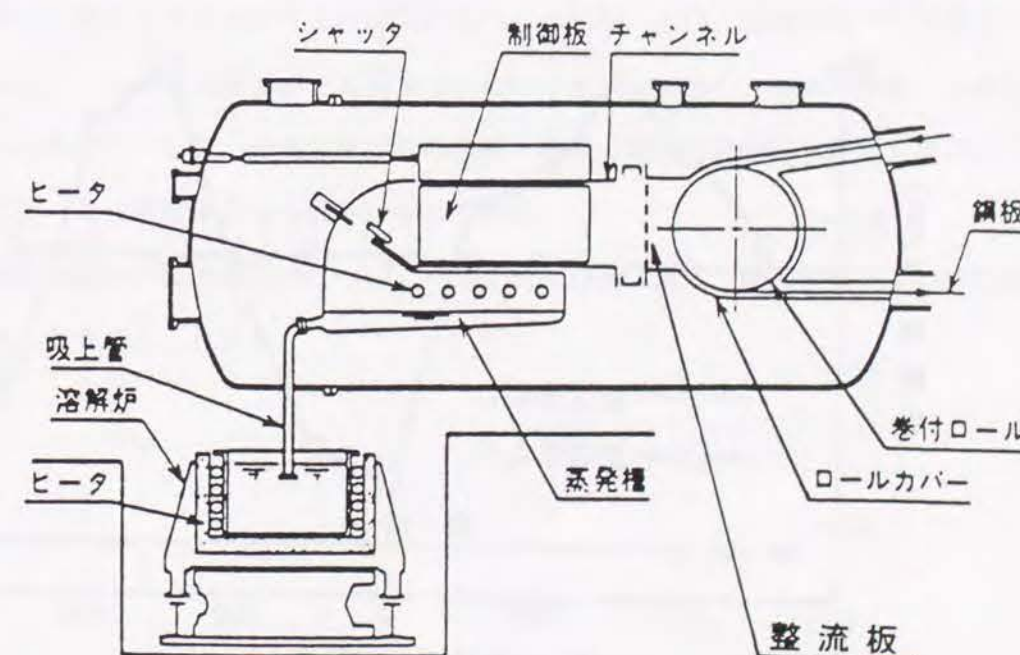


図1.3 蒸着室の構造

巻付ロールの周囲を、チャンネルとつながっているカバーで覆い、亜鉛蒸気の漏えいを防止している。チャンネル内にシャッタを設け、亜鉛蒸気の流量を調整する。鋼板への亜鉛蒸気の付着量は、ヒータの電力とこのシャッタの開度によって制御される。

(a) 蒸着室の工業上の問題点

シャッタと巻付ロールの間とを単に矩形断面を有するチャンネルで連結した構造の場合には、図1.4に○印で示したように凹凸の程度が平均値に対して±30%にも及ぶ双峰状の付着量分布が生じ、均一な膜厚の蒸着膜が得られない。

そこで、チャンネル内の流れを均一にする目的のために開口率50%の多孔整流板を設けた。本整流板を設置した場合の付着量分布を図1.4に△印で示す。浴温、シャッタ開度によらず、鋼板幅方向付着量分布の凹凸は平均値に対して±5%と良好な結果が得られている。

整流板を設置すれば、鋼板端部を除いてすべての運転条件において均一な亜鉛蒸気の付着量分布が得られるが、鋼板端部では、蒸着室圧力によって分布が変化する問題が残る。このため図1.5に示すようにさらに鋼板幅に応じてチャンネル幅を変更できる可動式の制御板を設けている。

均一な蒸着膜厚分布を得る事は、蒸着面に対する均一な質量流量分布を得ることに対応する。質量流量分布を知るには、流れ場の流速及び温度（飽和蒸気圧、密度に一意的に対応する）を知らなければならない。しかしながら、現状ではこの情報を得る

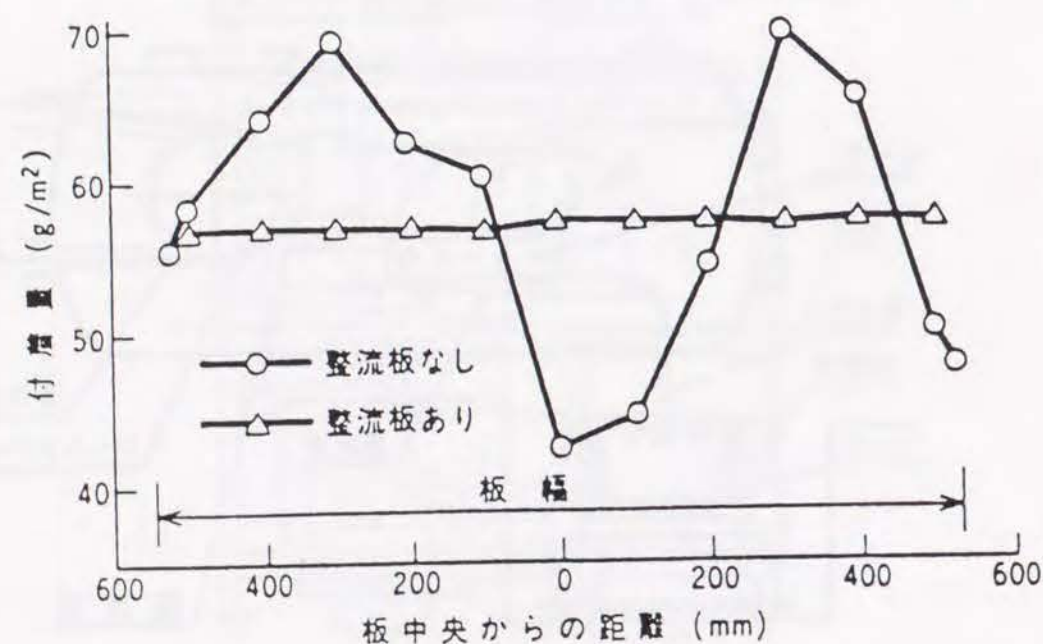


図1.4 付着量分布測定結果

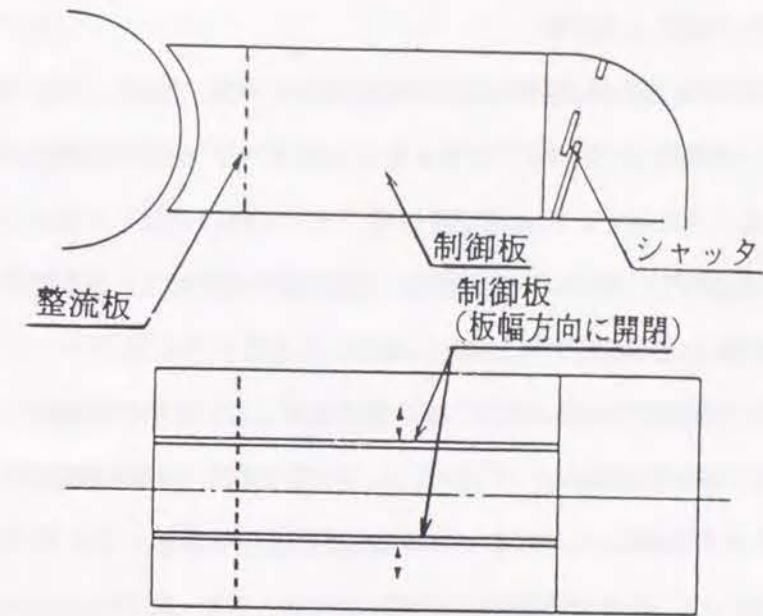


図1.5 制御板

手段がないため、以上述べたような工業上の工夫は常にTrial & Error的な技術開発によって行われており、希薄気体流れの温度・速度場を解明するための実験技術が強く求められている。

1.2.2 本論文との関連性

本論文は将来的に(2)項で述べた連続真空シール装置における気体の洩れ流量を最小化するための「微少すきまにおける希薄気体流れ」の解明、及び、(3)項で述べた蒸着室の形状を最適化し、均一な成膜分布を実現するための「金属蒸気流れ」現象の診断・予測を行うための手がかりとして、希薄気体流れの温度・速度の定量的診断法を確立することを目的として行った研究結果を取り纏めたものである。

希薄気体流れの温度評価法については第2章及び第3章で、速度評価法については第4章、第5章で論じられる。

1.3 希薄気体流れの計測法の現況と本研究の位置づけ

1.3.1 計測法の種類と適用域

希薄気体流れの計測法は宇宙工学の発展と軌を一にしており、1960年代より電子ビーム法を中心として発展してきた。最近のレビュー^[D2, D3]を基に主要な計測法と適用数密度域の関係を図1.6に示す。RF放電法及び電子ビーム法以外はいずれもレーザ光源を用いた分光学的手法であり、特にレーザ誘起蛍光法が適用域の広さから見ても将来的に汎用性の高い診断法であると予想されている。

レーザの入手が容易となってきた1970年代後半より、流れの可視化・計測手法にもレーザを適用する研究が活発になってきた。レーザを応用した流れ測定法として早くから実用化の域に達した手法は、レーザドップラ流速計(LDV)である。しかし、このLDV法は流れ場中に固体あるいは、液体粒子をトレーサとして混入させ、それら粒子の散乱光を観測する原理を用いているので、固体や液体の重い粒子が流れに追従する条件を満足する程度に流れ場流体の密度が十分大きいことが必要である。しかしながら、密度が低い希薄気体流れ中ではトレーサが追従できず、LDV法は適用出来なかった。

レーザ誘起蛍光法は流れ場の原子・分子に着目するので、LDV法の持つトレーサ追従性の問題がなく、希薄気体流れの可視化・計測手法のみならず、燃焼解析などの分野でも注目されている。レーザ誘起蛍光法の特徴としては、

- (1) 流れ場の原子・分子に着目するので、トレーサ追従性の問題がほとんどない
- (2) 流れの場を乱すことなく非接触測定できる

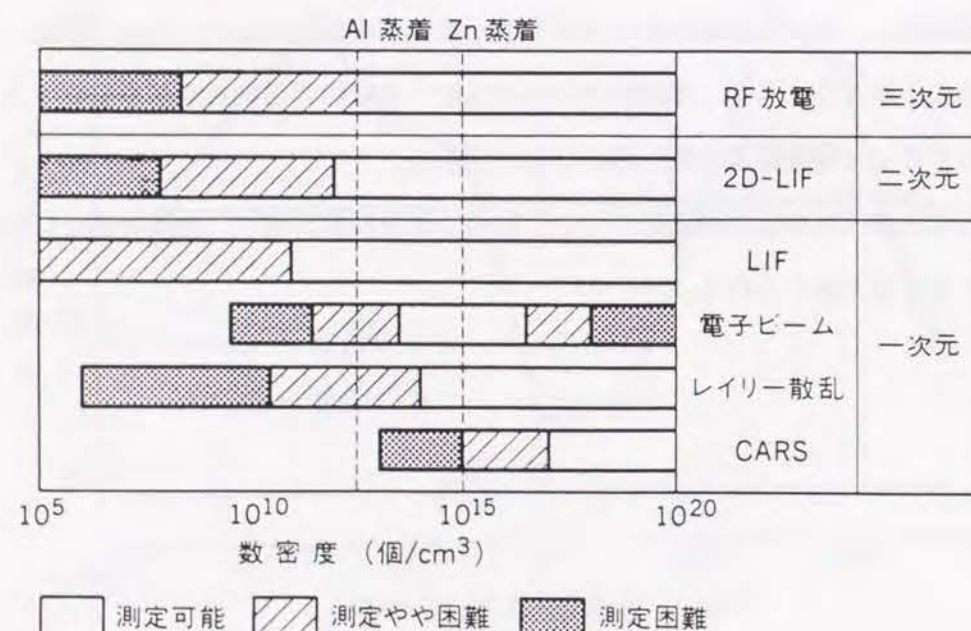


図1.6 各種測定法の適用範囲^{[D2] [D3]}

(3) 多成分気体(イオン, ラジカル等を含む)において、特定の成分に着目した測定が可能である

(4) 温度, 速度, 密度, 圧力など多数の物理量の定量的測定が可能である

(5) ラマン散乱法やレイリー散乱法などに比べて測定数密度範囲が大きいなどが挙げられる。

レーザ誘起蛍光法と一口に云っても手法は対象とする原子・分子によって千差万別である。表1.2にレーザ誘起蛍光法を流れの診断に適用した例を原子・分子種類別にその特徴と代表的文献とともにまとめた。1980年代にはLIF法を流れの可視化に適用し、流れを定性的につかむ研究例が多かったが、近年、蛍光スペクトルを量子力学的に検討し流れを定量化する試みが多くなっており、本研究もその流れに沿った研究としての位置づけを持っている。本研究においては、表1.2の中の動作気体を直接励起するレーザ誘起蛍光法の一つであるO₂-LIPF(LIPFとLIFの相違については第2章において詳述する)と、又、気体中にトレーサ気体を混入させてレーザ誘起蛍光法を適用する手法の一つであるI₂-LIF(第4章及び第5章)をとりあげるが、ここでは第2章以下の議論の準備としてレーザ誘起蛍光法の概要をまとめておくことにする。

1.3.2 レーザ誘起蛍光法の基本原理

レーザ誘起蛍光法はレーザ分光法の1つであり、図1.7に示すように分子を下位準位から上位準位に選択的に励起し、それが励起状態から再び下位準位に戻る際に放出する光(蛍光)を調べることによって分子・原子の状態を知る手法である。

20世紀前半において発達した量子力学と分光実験の成果によって、詳細な原子・分子構造に関するデータは蓄積されていたが、線幅の狭い、つまり単色性の強いレーザが出現するまで、単純なスペクトル分光の結果からだけでは温度, 速度を定量的に十分正確に特定することはできなかった。

何故なら、単純な分光によって得られる蛍光スペクトルからは、どの遷移ルートを通して発せられたかを特定できないからである。本研究における実験で使用する線幅の狭い単色レーザ光を連続掃引

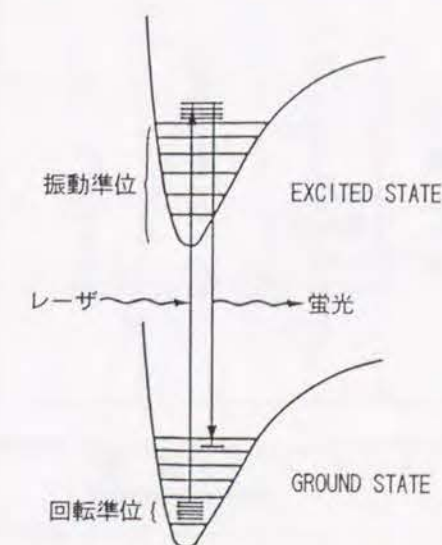


図1.7 レーザ誘起蛍光法

表1.2 各種レーザー誘起蛍光法のまとめ

手 法	対象分子・原子	特 徴	文 献
レーザー誘起蛍光法 (LIF・LIPF)	ト レ ー サ 気 体	<ul style="list-style-type: none"> ● 蛍光を強く発するので蛍光の検出が容易。 ● 分子の超微細構造は線幅が細いので速度解析能が高い。 ● 毒性ガスなので、取扱に注意を要する。 	[J1]~[J13]
	ジアセチル ($\text{CH}_3(\text{CO})_2\text{CH}_3$)	<ul style="list-style-type: none"> ● 蛍光を強くするので検出容易、かつ毒性もない。 ● 分子構造が複雑なので、スペクトル解析は困難。(定量性に難あり) 	[D33]~[D37]
	ナトリウム原子 (Na)	<ul style="list-style-type: none"> ● 低数密度でも蛍光を出すので信号検出容易。 ● ハンドリング性が悪い。 	[D1]
	カリウム原子 (K)	<ul style="list-style-type: none"> ● 低数密度でも蛍光を出すので信号検出容易。 ● ハンドリング性が悪い。 ● Naよりも原子量が大きいので、Al, Zn等のPVD(物理蒸着)に対する模擬実験用気体となりうる。 	[L1, L2]
	窒 素 分 子 (N_2)	<ul style="list-style-type: none"> ● 励起エネルギーが高く1光子LIF, LIPFでは計測不可能。 ● MPI (多光子イオン化法)での研究例があるが、装置は複雑かつ高価。 	[D5]
	窒 素 原 子 (N)	<ul style="list-style-type: none"> ● 1光子LIFでは計測不可能。 ● MPI (多光子イオン化法)での研究例がある。 	[D9]
	酸 素 分 子 (O_2)	<ul style="list-style-type: none"> ● 毒性無、ハンドリング性が容易。 ● 前期解離 (predissociation) 性があるため、高圧域でのクエンチングの影響がなく蛍光信号の線型性が良い。 	[F1]~[F16]
	酸 素 原 子 (O)	<ul style="list-style-type: none"> ● 1光子LIFでは計測不可能。 ● MPI (多光子イオン化法)での研究例がある。 	[D7, D8]
	一酸化窒素 (NO)	<ul style="list-style-type: none"> ● 毒性があるが、蛍光が強いので研究が進んでいる。 ● 高温域では大気成分として存在するのでトレーザー不要。 	[D16]~[D32]
	対象の分子・原子を選ばず	<ul style="list-style-type: none"> ● 選択励起ではないので、厳密な定量性に欠けるが、レーザー出現以前における唯一の希薄流計測法。 ● 装置が簡単かつ軽量なので、実フライト機にも装備可能。 	[D4]
電子ビーム蛍光法 (EBF)			
実 在 空 気			

できるリングダイレーザーやエキシマレーザーの出現は、1980年代においてレーザー分光の研究を一変させた。現在では、気体の成分分析をはじめとして緩和、反応、衝突、遷移確率等の原子・分子レベルの現象や原子・分子数密度がある程度以上の気体の物理的諸量(温度、速度、密度)の測定手段とすべく研究が行われている。

レーザー誘起蛍光法を希薄気体流れ計測に適用する際の工学上の研究課題は、入手可能なレーザー波長、線幅、強度、光の持続時間が限定されているので、『どんな気体成分に注目すれば、どの圧力(数密度)、温度、速度範囲で工業応用上意義ある測定を行い得るのかを見極める』ことである。したがって、研究の内容は、既に蓄積された分子・原子データから、特定範囲の圧力、温度、速度を持った場におけるスペクトルを理論的に予測し、それらの予測スペクトルを実験的に実証確認することになる。

ここで次章以降の準備として、温度、速度、密度等を定量的に計測するレーザー誘起蛍光法の原理を簡単にまとめておく。基本的には、レーザー分光の技術^{[M2] [D15]}を活用して、分子の回転遷移の選択励起によって得られる蛍光スペクトルの詳細な分析から、計測対象となる場の情報を得ることになる。まず基本となるスペクトル形状について見ると、それは気体の種類、温度、圧力(数密度)などによって決まる。したがって、スペクトル形状それ自体が場の状態を示している。スペクトル形状の分析はレーザー誘起蛍光法による場の測定には必要不可欠である。スペクトル形状は大きく2つに分けらる。その一つは分子の速度関数に起因するドップラ型スペクトル形状(図1.8)であり、他の一つは分子の自然幅、衝突幅に起因するローレンツ型スペクトル形状(図1.9)である。図1.8と図1.9では同一の半値全幅を持つ両スペクトル形状が描いてある。図に見られるようにローレンツ型スペクトル形状は裾野が広く、広い波長にわたっているのが特徴である。実際には両者の混合である複合型スペクトル形状

(図1.10)として観測されることが少なくない。本研究では O_2 -LIPFにおいては、自然幅が支配的であるので、スペクトル形状をローレンツ型スペクトル形状と見なす立場から、また、 I_2 -LIFではそれを複合型スペクトル形状と見なす立場から考察を行っている。

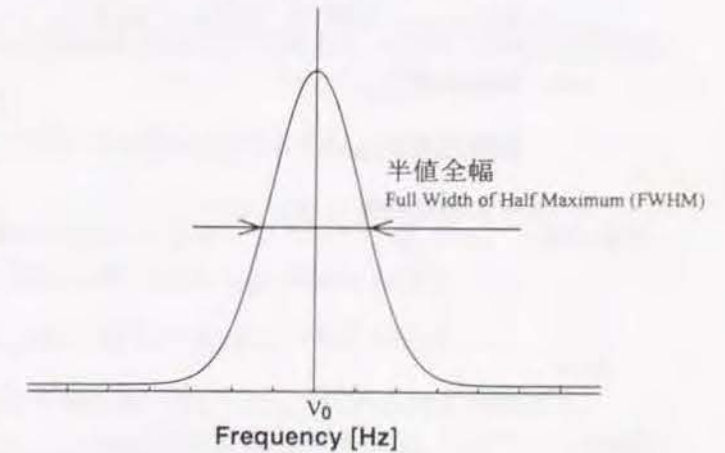


図1.8 ドップラ型スペクトル形状

(a) 温度 T の測定

(i) 並進温度 T_{tr}

分子とレーザ光の共鳴スペクトル線が有するドップラ幅 $\Delta\nu_D$ (FWHM) は Maxwell-Boltzmann 分布の特性パラメータと関係づけられる。ところで、温度平衡状態にある気体分子は Maxwell-Boltzmann 速度分布則に従っている。したがって、図 1.8 のスペクトル半値全幅は並進温度と次式の関係がある。

$$\Delta\nu_D = 2\nu_0 \left(\frac{2kT \ln 2}{mc^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.1)$$

そこでスペクトル半値全幅を測定することにより、並進温度を求めることが出来る。

しかし、現実のスペクトル線幅には分子間の衝突に起因する衝突幅や、分子の励起寿命に起因する自然幅などが付随しており、ドップラ幅のみを分離することは常に可能とは限らないので、場に応じて詳細な検討が必要となる。

ドップラ幅から並進温度を推定する場合の実際例及び問題点については、本論文第 5 章において実験的、理論的に論ずる。

(ii) 回転温度 T_{rot}

回転温度 T_{rot} は 2 本以上の回転スペクトル線から測定することが出来る。回転スペクトル線の強度 $I_{J^*J^*}$ は

$$I_{J^*J^*} = \text{const} \cdot q_{v^*v^*} \cdot S_{J^*J^*} \cdot N_{v^*J^*} / (2J^* + 1) \quad (1.2)$$

$$N_{v^*J^*} = (2J^* + 1) \exp(-G''(v^*)/kT_{vib}) \exp(-F''(J^*)/kT_{rot}) / Q \quad (1.3)$$

で表わされる^[D16]。ここで、 $q_{v^*v^*}$ はフランク・コンドン因子 (Franck-Condon factor),

$S_{J^*J^*}$ はヘーネル・ロンドン因子 (Hönl-London factor), $N_{v^*J^*}$ はボルツマン分布による準位占有率, $G''(v^*), F''(J^*)$ はそれぞれ振動および回転準位エネルギー, J は

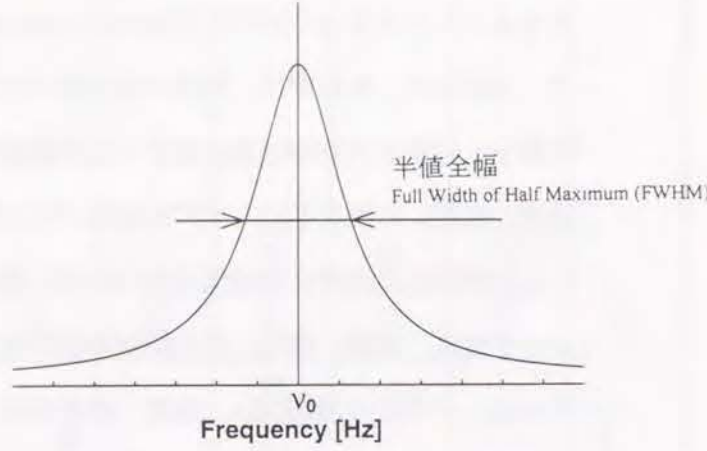


図 1.9 ローレンツ型スペクトル形状

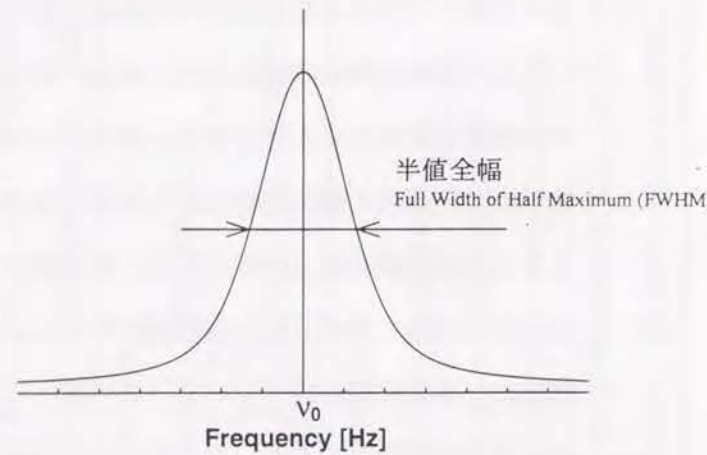


図 1.10 複合型スペクトル形状

回転量子数, Q は分配関数, 添字 $''$ はそれぞれ下位準位, 上位準位, k はボルツマン定数を表わしている。式 (1.2) より回転温度 T_{rot} は,

$$\ln \left(\frac{I_{J^*J^*}}{S_{J^*J^*}} \right) \propto -\frac{1}{kT_{rot}} F''(J^*) \quad (1.4)$$

となるので、実験によってスペクトル線強度 $I_{J^*J^*}$ を計測し、回転スペクトル線のブランチ番号をスペクトルシミュレーションなどによって同定し、 $S_{J^*J^*}$ 、及び、 $F''(J^*)$ を決めれば、 T_{rot} を得ることができる。

本論文の第 2 章、第 3 章で詳述する O_2 -LIPF は回転温度計測を取り扱っている。その理由を以下に述べる。回転温度は非平衡性の強い希薄自由噴流中などにおいて

$$T_{tr} \approx T_{rot} \ll T_{vib}$$

の関係が成立しており、気体の代表温度としての並進温度とほぼ同一のふるまいを示す。この理由は、気体分子運動において、回転運動の緩和は振動運動の緩和に比べ極めて早く起こり、並進運動エネルギーと平衡になりやすいからである。

並進温度は前項(i)でも述べたように、原理的にはドップラ幅から測定可能であるものの、測定誤差を含みやすい要因が多い。したがって、希薄気体流れの場合には、スペクトル線強度から算出可能な回転温度を場の代表温度として考えることがしばしば行われ、本論文の O_2 -LIPF による回転温度測定の場合もこのケースにあたる。

(iii) 振動温度 T_{vib}

振動温度 T_{vib} は 2 つの異なるバンドの全体強度分布から測定することが出来る。

式 (1.2) 及び (1.3) を回転準位全体にわたって積分して得られるバンドの全体強度 $I_{v^*v^*}$ に対する式

$$\ln \left(\frac{I_{v^*v^*}}{q_{v^*v^*}} \right) \propto -\frac{1}{kT_{vib}} G''(v^*) \quad (1.5)$$

によって、 T_{vib} を決定することが出来る。本論文では振動温度については取り扱わないが、第 2 章、第 3 章で論述する回転温度評価法を拡張すると容易に振動温度評価法として応用することが可能である。

(b) 速度

速度 u はある特定のスペクトル線中心波長 ν_0 のドップラシフト量 $\Delta\nu_{DS}$ と光の速度 c から次式で計算する。

$$u = \frac{\Delta\nu_{DS}}{\nu_0} c \quad (1.6)$$

スペクトル線中心波長のドップラシフト量を正確に検出するには、スペクトル線幅は狭い方が測定分解能の観点から有利となる。第 4 章に示すように回転スペクトル線幅よ

りもさらに狭い、原子核スピンの起因する超微細構造によって生ずるスペクトル線幅にまで逆上る必要性が出てくる。

(c) 密度

密度はレーザ誘起蛍光法によって得られる蛍光信号強度 $I_{J''J'''}^{v''v''}$ から求めることができる。式(1.1)を書き換えて、

$$I_{J''J'''}^{v''v''} = \text{const}' \cdot q_y(Q_u) \cdot q_{v''v''} \cdot S_{J''J'''} \cdot N_{v''J''} / (2J'' + 1) \quad (1.7)$$

と表すことができる。ここで const' は蛍光の検査体積、光学系内の光強度の減衰、フォトマルを見込む立体角、フォトマルの量子効率等を含む計測システム固有の定数で、キャリブレーションで決められるべき値である。また、 $q_y(Q_u)$ は量子収率(quantum yield)であり、クエンチングレート Q_u の関数である。 $N_{v''J''}$ は振動・回転準位 $v''J''$ のボルツマン分布に従う準位占有率であり、温度 T の関数である。一般に、定性的には密度が高くなる程 $I_{J''J'''}^{v''v''}$ の値が大きくなるので、その測定値から密度が決定できるが、式(1.7)からわかるように、密度を定量的に精度よく計測するには、クエンチングレート Q_u 、温度 T を別途知る必要がある。ただし、希薄流体流れを対象とする場合、分子間の衝突頻度が少いので Q_u が計測精度の支配因子となる場合は比較的少ない。

(d) 乱流変動

密度、温度変動についてはNO-LIF、 O_2 -LIFを用いて測定を行った例が最近報告されている^[D10]。また、文献[F5]などでは、それらの非定常可視化像が撮影され報告されている。いずれも原理は(a)(c)による信号を時間的に追跡していくものである。速度変動の測定も原理的には可能と考えられるが、本論文で議論する定常な流れ場の定量的評価に関する研究が十分蓄積された後に検討される課題であろう。

1.3.3 I_2 -LIF法の位置づけ

本論文では速度計測法として I_2 -LIF法を論ずるので、その現状について述べ本研究の意義を明らかにしておく。

I_2 -LIF法は流れ場中に異種気体をトレーサとして混入させる方式のレーザ誘起蛍光法の一つである。トレーサ気体とすべき原子あるいは分子は全く自由に選定できるわけではなく、入手可能なレーザ技術やレーザ機種と密接に関連した限定を受ける。Baganoffは、1986年のレビュー^[D1]でレーザ誘起蛍光法を代表する原子・分子の候補として、よう素(I_2)、ジアセチル($CH_3-(CO)_2-CH_3$)、ナトリウム原子(Na)を挙げているが、それらいずれもが、毒性、クエンチング、燐光の存在、ハンドリングの困難性等の問題を有することを指

摘している。実際、これらの原子・分子は適用対象となる燃焼、希薄気体流、極超音速流などの現実の場に自然に存在することは極めてまれであり、「場に存在する原子・分子を励起して、直接に場の情報を得る」レーザ誘起蛍光法本来の利点に若干背く面がないわけではない。特に分子が非平衡となりやすい希薄気体流れでは、トレーサが場の値を真に代表し得るのか否か疑問が生じ易い。

しかし一方、工業応用上の適用と云う観点からは、次の有用点がある。

- (1) 蛍光を発しやすいトレーサ気体を使うことは、流れ場分子の直接励起法のように高価なレーザ発振器や光学装置、又長い時間的な手間を必要とせずコストパフォーマンスから大変使いやすい。
- (2) 速度分解能を上げるために特に線幅の狭いスペクトル線が必要な場合には、線幅の太い流れ場分子の直接励起よりも、スペクトルに分子の超微細構造が現れやすいトレーサ気体、特に I_2 を利用する方が有利である。

したがって今後ともトレーサ気体を用いて希薄気体流を調べる手法は活用されるものと考えられる。そこで、本論文では、特に上記利点(2)を重視する立場から I_2 -LIFについて検討する。

トレーサ気体としては、レーザによって容易に励起されて蛍光を発しやすく、ZnやAlの蒸着装置を研究するための模擬蒸発金属として使用もできるアルカリ金属の蒸気がある^[D1]。アルカリ金属蒸気の場合には、蒸発するつばから発生する金属蒸気流そのものとして研究も出来る可能性があり、将来的には有望であるが、まだ研究例は極めて少なく、今後の検討を待たねばならない面が多々あるので、本研究では採用しなかった。

一方、よう素をトレーサ気体として用いる I_2 -LIFについてはHansonら^[J10]による詳細なレビューがある。 I_2 分子はよく蛍光を発する分子として古くから知られており、分子の分光データは豊富である。この方法ではトレーサとして混入させる I_2 分子の挙動が、主流気体の挙動を代表するものと見なすが、 I_2 は重い分子であるため、希薄度が増す(高真空になる)につれて主流気体を構成する原子・分子への追従性に関する問題点が増大すると指摘されている。しかしながら、蛍光を発しやすいので、希薄気体流れへのLIF法の適用性を評価するためには便利であり、また、流れ場の可視化法にも適しており、研究例^[J1, J2, J3, J5, J6, J7, J8]が多い。その上、 I_2 分子固有の性質から、その回転スペクトルの超微細構造が現れ易く、それに着目すれば本論文で目的とする速度測定の分解能を上げ得るという利点がある。そこで、有毒性と装置に対する腐食性の点で使いづらい面があり、小規模な実験には良いが大規模な工業的実験には不適との欠点もあるものの、速度測定を実

現する観点から、本論文では、従来ほとんど試みられていない I_2 の超微細構造の分析と、その速度測定への応用について検討することとした。その内容については、第4章、第5章で述べる。

1.3.4 O_2 -LIPF法の位置づけ

本研究では、温度計測法として、 O_2 -LIPF法を取り上げた。そこで、主流気体を直接励起する手法として近年急速に研究が進められている O_2 -LIPF法に関する研究例を概観し、本論文に記載する検討内容の意義を述べる。

可変波長紫外レーザ（エキシマレーザ）や色素レーザの入手が比較的容易になり始めた1980年代後半頃から、空気の主成分である O_2 、 N_2 や、高温空気の成分である NO 、 N 、 O に、また、燃焼の分野では H_2 、 CO 、 OH 、 H 等の実際の場合に存在する原子・分子を直接計測対象とする方法に関する検討が現れはじめた。

レーザ誘起蛍光法の原理自体は、得られる蛍光のスペクトルを同定し解析することによって、温度、速度などの物理量情報が得られることにあるので、対象とする原子・分子がいかなる種類であっても本質的差異はない。ただし、対象とする原子・分子によって分光学的性質が異なるため、スペクトル線の同定及び解析は注目する原子・分子種ごとに行う必要があり、かつ、それぞれの原子・分子種ごとに精度よい計測が可能な温度範囲、数密度範囲についての検討が必要である。

図1.11に圧力 10^{-2} atmに於ける空気の平衡成分^[C3]を示す。2000°K以下では O_2 、 N_2 が主成分であるが、温度が高くなるにつれて NO 、さらに高温では解離により O 、 N の成分が増大する。したがって、希薄気体流れのレーザ誘起蛍光法による計測においては N_2 、 O_2 、 NO 、 O 、 N を対象原子・分子に選ぶことが少なくない。

N_2 に関しては、蛍光の強いバンドとして、1st Negative System($X^2\Sigma_g^+ \leftarrow B^2\Sigma_u^+$)、2nd Positive System($B^3\Pi_g \leftarrow C^3\Pi_u$)がよく知られており、レーザ誘起蛍光法以外の電子ビーム蛍光法(EBF:Electron Beam Fluorescence)^[D4]あるいは最近研究されつつあるREMPI(Resonantly Enhanced Multiphoton Ionization)^[D5]によって蛍光が得られる。また、数密度が高ければ、 N_2 -CARSが適用可能な場合もある^[D6]。しかし、ポテンシャル曲線図^[M1]を参照するとわかるように、 N_2 の基底状態 $X^1\Sigma_g^+$ から遷移可能かつ商用紫外レーザに適合する波長域で遷移可能な N_2 準位が存在しないので、レーザ誘起蛍光法を用いた決定的手法が見出されていない。

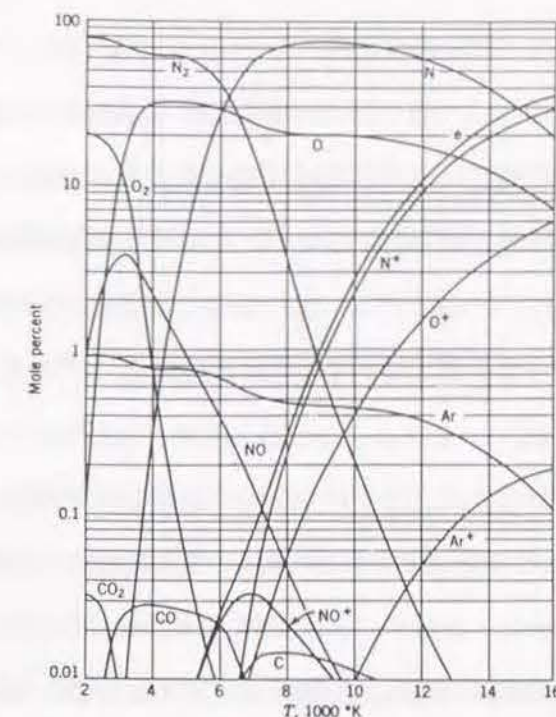


図1.11 空気の成分(at 0.01atm)^[C3]

O 原子に関しては、Bittnerら^[D7]は、226nmのレーザ光による2光子吸収過程($2p^3P \rightarrow 3p^3P$)によって生ずる蛍光(844.7nm: $3s^3S^o \leftarrow 3p^3P$)に対してクエンチングの検討を行った。Beckら^[D8]はこの過程を利用してGöttingenの高エンタルピー風洞HEGに適用することを計画している。 N 原子に関しては、Copelandら^[D9]は、211nmのレーザ光による2光子吸収過程($2p^4S^o \rightarrow 3p^4D^o$)によって生ずる蛍光(869nm: $3s^4P \leftarrow 3p^4D^o$)に対して $3p^4D^o$ の寿命やクエンチングの検討を行っている。

しかしながら一般に、 O 原子、 N 原子についても励起エネルギー準位が高いので、単純な1光子レーザ誘起蛍光法では蛍光が得られないので、研究例は多くなく、希薄気体流れの計測に応用するには無理がある。

NO のポテンシャル曲線^[D16]から判断すると、基底状態 $X^2\Pi_r$ に対して可能な遷移として、

$$\gamma\text{-Bands: } X^2\Pi_r \leftarrow A^2\Sigma^+ \quad (5.5-7.0\text{eV})$$

$$\beta\text{-Bands: } X^2\Pi_r \leftarrow B^2\Pi_r \quad (5.7-6.6\text{eV})$$

$$\epsilon\text{-Bands: } X^2\Pi_r \leftarrow D^2\Sigma^+ \quad (6.3-7.0\text{eV})$$

がある。励起光源として、ArF⁺レーザ(193nm)を用いた場合、上記の γ 、 β 、 ϵ バンドにおけるいずれの遷移も起こり得るので、温度範囲によっては、互いのバンドが重り合うなど、スペクトルはかなり複雑なものとなる。したがって、実際の計測に先立って、スペクトルの挙動をシミュレーションによって十分把握しておく必要がある。 γ 、 β 、 ϵ バンドの振動・回転スペクトルのシミュレーション方法については文献[D16, D17]に詳述されて

いる。シミュレーションに必要な公式、分子定数は文献[M5]、フランク・コンドン因子は文献[D26]、ヘーネル・ロンドン因子は文献[D27, D28]に述べられている。

Gundlach, 筆者らがArF*レーザ(193nm)を用いて、Göttingen V2G風洞において、宇宙往還機の大気圏再突入時を想定したNO分子と高温面との衝突現象を測定した例^[D19, D20]があり、また、その他の計測例では、Hansonらによるリングダイレーザ+非線形結晶^[D23]または、エキシマレーザ+ダイレーザ+非線形結晶^[D21, D22]による第2高調波(～225nm)を用いた実験例がある。

また、文献[D21, D22]では、エキシマレーザ光をシート状にして場を2次元的に計測するPLIF(Planar Laser-Induced Fluorescence)技術を用い、自由噴流の速度場、温度場を描き出している。さらに、注目すべき計測例^[D3]には、NO-LIFで得られた乱流境界層内の温度変動及び密度変動成分の分布を、熱線風速計による値と比較した例もみられる。このように、NOは実在気体成分であるN₂、O₂、NO、N、Oの中で最も蛍光が得られやすいことから最も研究が進んでいる。しかしながら、室温レベルの流れに対してはNOが実在しないので強制的にトレーサ気体として混入させる必要があること、また毒性を有する点で使用上不便があることから、本研究では採用しなかった。

一方、O₂は図1.11でも示したように、工学上使用頻度が大きい3000°K以下の温度範囲では空気の主成分である。またNOのように毒性もなく、実験上の取扱いも容易である。それゆえ、レーザ誘起蛍光法の対象分子として1980年代後半より研究が進められてきた。一方ではI₂に替って、O₂を用いた可視化法も開発されつつある^[F1, F2]。以上のようにO₂-LIPF法は定性的、定量的両面から希薄気体流れの代表的測定法として近年研究が行われている。本研究においても同じ観点から、O₂-LIPF法を取り上げ、それをO₂-LIPF法の定性的可視化用手法としてではなく、定量的温度測定法、特に、希薄気体流れに特有な振動・回転温度非平衡現象についても分析を可能とする使用法として開発する目的から検討を加えることとした。

なお、O₂分子は第2章で述べるように前期解離の効果によって励起分子がクエンチング(無放射失活)しにくい性質を有するため、温度測定用の対象分子として適しているが、この性質のせいで回転スペクトルの線幅は広く、また、紫外域の極狭線幅を利用することもできず、ドップラシフト計測には大きな誤差が伴うことになり、それを速度測定に利用することは得策でない。

1.4 本論文の内容

本論文は6章から成り、その概要は次のとおりである。

第1章においては、本研究の背景及び目的を説明する。ここでは希薄気体流れの基本物理量である温度及び流速の測定技術として、O₂-LIPF法を温度測定用に、また、I₂-LIF法を速度測定用に選定した本研究の位置づけを述べる。

第2章においては、工業的応用が広いと考えられる2原子分子を対象とするレーザ誘起蛍光法の回転スペクトル解析手法を一般的に提示し、O₂シューマン・ルンゲ・バンドについて具体的に解析を行った結果を説明する。本解析手法を用い、O₂-LIPF法を実際に応用する可能性の高い振動・回転温度の領域におけるスペクトルの特性を明らかにし、O₂-LIPF実験において着目すべき遷移バンドを検討する。

第3章においては、O₂-LIPF法を用いて、軸対称超音速自由噴流の中心軸上で得られたスペクトル測定結果と第2章で提示したスペクトル解析手法によるスペクトル計算結果を比較し温度領域ごとに回転スペクトル線のブランチ番号の同定に関し吟味する。ついで、そのブランチ同定法に基づく軸対称超音速自由噴流の中心軸上回転温度測定結果、及び軸対称超音速噴流中における固体表面近傍の回転温度測定結果から、振動・回転温度の非平衡状態を含む希薄気体流れに対するO₂-LIPF法の有用性を検討する。

第4章においては、I₂-LIF法を用いて希薄気体流れの速度測定を行うために必要な、I₂-LIFに関するスペクトル解析手法を提示する。ここでは、従来行われてきた回転スペクトル線のドップラシフト量のみを考える方法では速度測定精度を上げることが出来ないことから、I₂分子に含まれる核スピンの起因する超微細構造の効果を考慮したスペクトル形状を広い圧力、温度範囲について検討し、スペクトル形状と速度測定精度との関連性について述べる。

第5章においては、まず第4章で理論的に予測されたスペクトル形状とI₂-LIF実験で得られたスペクトル形状を比較し、解析手法の妥当性を調べる。ついで、軸対称超音速自由噴流中の中心軸上各位置における流速をI₂-LIF法を用いて測定した結果を述べる。最後に本研究の主要な課題である真空蒸着装置におけるシール装置ロール間ギャップ流れに対しI₂-LIF法を用いた結果を検討し、希薄気体流れの速度測定に対するI₂-LIFの有用性を述べる。

第6章においては、本研究全体を総括する。

第 2 章

O_2 -LIPFによる温度測定理論

2.1 緒 言

本章では空気の主成分の一つである酸素分子(O_2)を直接励起するレーザ誘起蛍光法(O_2 -LIPF:Laser Induced Predissociative Fluorescence)を取り上げ、それを温度測定に応用する場合の理論的側面についての検討結果を述べる。

O_2 は毒性がなく、 I_2 等で常に問題となる実験装置、排気系の汚染やハンドリング上の危険性が無いので、レーザ誘起蛍光法(LIF法)を用いた実験には理想的な対象分子であり、1980年代後半より入手が容易となってきたエキシマレーザを用いると1光子過程に着目した直接測定が可能となりつつある。

レーザ誘起蛍光法による希薄流計測の基本は、観測された蛍光スペクトルパターンから対象としている温度場・速度場の情報を正確に逆予測することである。すなわち蛍光は種々の分子過程の結果として生ずるものであり、その分子過程は気体の運動の統計力学的性質を特徴づける温度状態に依存する。その状態を量子力学的知見に基づいて推算するのだが、蛍光スペクトル(結果)から場の状態(原因)を一意的に逆予測することが可能かどうかは、必ずしも自明ではない。本章では場の状態(原因)と蛍光スペクトル(結果)との因果律について理論的検討を行う。その際に、分子の振動運動と回転運動が必ずしも温度平衡にない状況を想定して検討を進める。温度非平衡にある気体の温度計測について検討した例はこれまで少ないが、希薄流れでは、分子の振動運動と回転運動が平衡に達するに十分な分子衝突回数が常に保障されるとは言えず、非平衡状態は生じがちであると判断される。本章では、まず(1) O_2 -LIPF法では通常のLIF法に比べ、前期解離現象を積極的に利用する点で蛍光強度と気体の数密度との線型関係が広い圧力範囲で成立することを理論的に確認し、 O_2 -LIPF法の適切な運用圧力範囲を検討する。つぎに、(2)振動運動と回転運動が平衡状態にある場合に対する2原子分子を対象とする回転スペクトルシミュレーション法を振動運動と回転運動が温度的に非平衡状態にある場合に対して拡張する。そして、(3)拡張された回転スペクトルシミュレーション法に基づいて、種々の温度範囲における回転スペクトルを予測し、その特性を明らかにする。最後に、(4)理論的に得られた回転スペクトル結果から、温度測定に適切と考えられる波長域について一般的に考察し、さらに ArF^* エキシマレーザ波長域に的を絞って希薄気体流れの温度測定に特に有用と考えられる遷移バンドの特性と温度の関係を調べる。

2.2 O₂-LIPFの理論

2.2.1 シューマン・ルンゲ・バンドのスペクトルシミュレーション

2.2.1.1 酸素分子の一般的な特徴

O₂スペクトルに関する総括的な議論はKrupenie^[E1]に述べられている。図2.1にO₂のポテンシャル曲線^[M1]を、表2.1にO₂分子の代表的な遷移バンド^[E1]をまとめておく。ArF*エキシマレーザをLIPFにおける励起光源として使用する場合、唯一の支配的なバンドはシューマン・ルンゲ・バンド($B^3\Sigma_u^- \leftarrow X^3\Sigma_g^-$)である。このバンドは175nm-535nmに広く分布している。表1に示すように、シューマン・ルンゲ・バンドは175nmと243nmの間において他のバンドから孤立しており、バンドの同定作業という観点から大きな利点を有している。KrF*エキシマレーザ248nmを用いる場合においても、シューマン・ルンゲ・バンドは重要なバンドの1つであるが、Herzberg Iバンドとの重りがあり、孤立バンドとしての利点は失われる。

シューマン・ルンゲ・バンドは紫外域にある強い吸収バンドとして、振動及び回転に関する分光学的分子定数が非常によく研究されている。このバンドの吸収スペクトルはYoshinoら^[E7]、Ackermanら^[E8]、Chung^[E2]らによって測定され、Creekら^[E4]、Lee^[E6]らによって理論的にも検討されている。特に上位準位($B^3\Sigma_u^-$)はChungら^[E3]によって下位準位($X^3\Sigma_g^-$)はVesethら^[E9]によって詳細な報告がなされている。

本節においては、前節で述べた狙い(2)に関連して、振動温度と回転温度が温度非平衡状態にある場合のシューマン・ルンゲ・バンドのスペクトルについての理論的検討を行う。

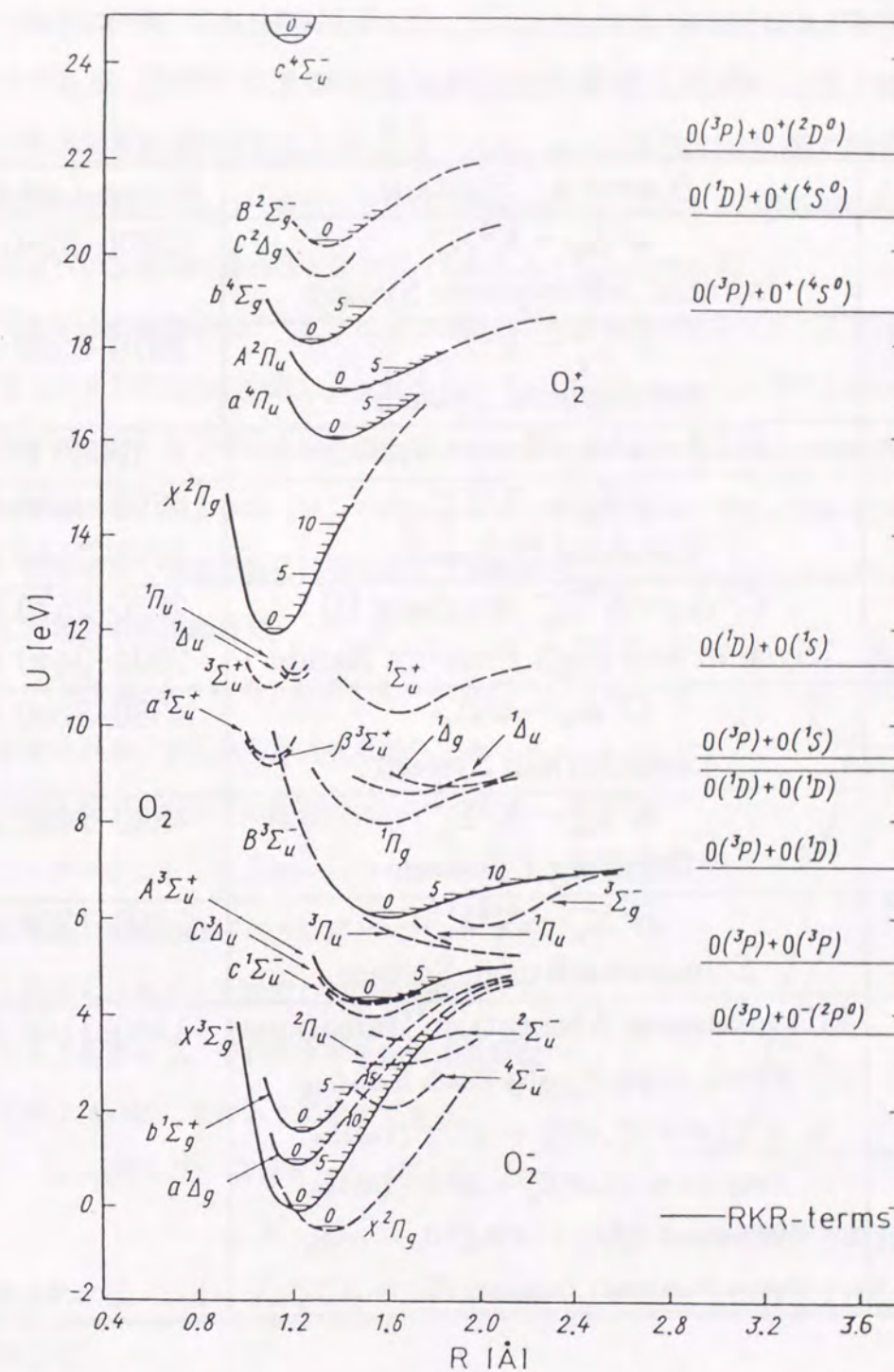


図2.1 酸素分子のポテンシャル曲線^[M1]

表2.1 酸素分子の代表的遷移バンド [81]

No.	Name of System	Wave Length
1	$a^1\Delta_g - X^3\Sigma_g^-$ Infrared Atmospheric System	15800-9240 Å
2	$b^1\Sigma_g^+ - X^3\Sigma_g^-$ Atmospheric System	9970-5380 Å
3	$b^1\Sigma_g^+ - a^1\Delta_g$ Noxon System	19080 Å
4	$c^1\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-$ Herzberg II System	4790-4490 Å 2715-2540 Å
5	$C^3\Delta_u - X^3\Sigma_g^-$ Herzberg III System and High Pressure Bands	2630-2570 Å 2924-2440 Å
6	$C^3\Delta_u - a^1\Delta_g$ Chamberlain System	4380-3700 Å
7	$A^3\Sigma_u^+ - X^3\Sigma_g^-$ Herzberg I System	4880-2430 Å
8	$B^3\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-$ Schumann-Runge System	5350-1750 Å
9	Miscellaneous Absorption Transitions Alberti, Ashby, Douglas Bands including $\alpha^1\Sigma_u^+ \leftarrow b^1\Sigma_g^+, \alpha^1\Sigma_u^+ \leftarrow X^3\Sigma_g^-$ (Tanaka Progression II), $\beta^3\Sigma_u^+ \leftarrow X^3\Sigma_g^-$ (Tanaka Progression I), $^1\Delta_u \leftarrow \alpha^1\Delta_g, ^1\Pi_u \leftarrow \alpha^1\Delta_g$. Ogawa-Yamawaki Transition $^3\Sigma^+ \leftarrow X^3\Sigma_g^-$	1580-1140 Å

2.2.1.2 $^3\Sigma - ^3\Sigma$ 遷移の特徴

シューマン・ルンゲ・バンドは等核分子 $^3\Sigma - ^3\Sigma$ 遷移の代表例の1つである。この遷移では、酸素原子の核スピンのゼロであること [M5] から、P ブランチとR ブランチが番号1 つおきに欠落しており観測されない。エネルギー状態 $^3\Sigma$ の核間方向角運動量量子数は $\Lambda = 0$ である。ここで、 O_2 分子中の各々の原子核と原子核を結ぶ軸（以後I軸と呼ぶ）方向の角運動量成分の大きさは $\Lambda\left(\frac{h}{2\pi}\right)$ である。スピン量子数Sは一般に電子の合計の数が偶数か奇数かにより、整数あるいは半整数であり、 $2S+1$ の多重項の性質がある。 $^3\Sigma$ のように三重項の場合は $2S+1=3$ だから、 $S=1$ である。

$\Lambda=0$ の場合には、スピンによる運動量に対応するスピンベクトル \vec{S} はI軸とは強くカップリングされていない。すなわち、「フントの(b)ケース」 [M5] と呼ばれる場合に相当するので、以下ではそれに準拠してシューマン・ルンゲ・バンドの振動・回転の各項を計算する。図2.2に「フントの(b)ケース」の運動量カップリングモデル図を示した。

図中に示した量子数Kは電子スピンを無視した場合の角運動量で、

$$K = \Lambda, \Lambda+1, \Lambda+2, \Lambda+3, \dots \quad (2.1)$$

と表される。すなわち、 $\Lambda=0$ のシューマン・ルンゲ・バンドの場合には、

$$K = 0, 1, 2, 3, \dots$$

となる。角運動量ベクトル \vec{K} とスピンベクトル \vec{S} から、スピンを考慮した総角運動量ベクトル \vec{J} を作ると、その有する総角運動量量子数Jは一般に次のように記述できる。

$$J = (K+S), (K+S-1), (K+S-2), \dots, |K-S| \quad (2.2)$$

具体的には、シューマン・ルンゲ・バンドに対して、

$$K=0 \text{ のとき: } J=1$$

$$K=1 \text{ のとき: } J=2, 1, 0$$

$$K=2 \text{ のとき: } J=3, 2, 1$$

である。

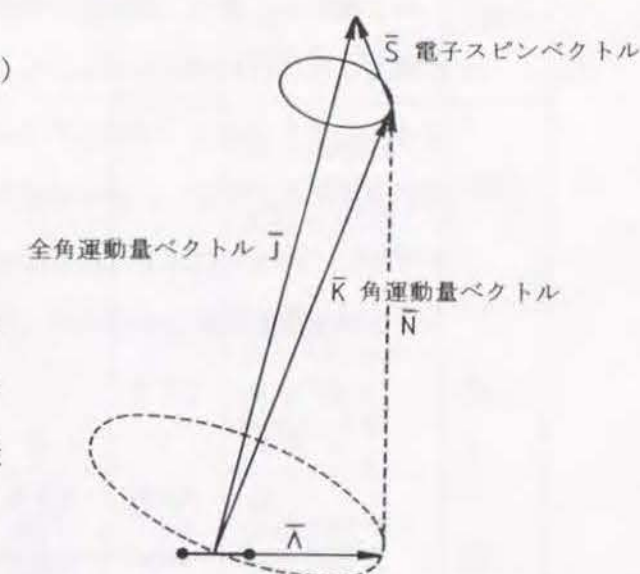


図2.2 角運動量と電子スピン角運動量とのカップリングモデル

$$\left. \begin{array}{l} \\ \\ \end{array} \right\} \quad (2.3)$$

式(2.3)式に見られるように、 $K=0$ のときに限って三重項にならない。

図2.3にシューマン・ルンゲ・バンドの構造を示す。図2.3では任意の振動準位をとり出して、上側の水平線は上位準位 ($B^3\Sigma_u^-$) を、下側の水平線は下位準位 ($X^3\Sigma_g^-$) を表す。 $K=0$ 以外の場合には、上位及び下位準位ともに三重項となっているから、各々の回転準位は3つの状態 F_1, F_2, F_3 に分裂している。ここで、 F_1, F_2, F_3 はそれぞれ $J=K+1, J=K, J=K-1$ に対応している。

図2.3に各回転準位の対称性に関する属性を \oplus あるいは \ominus 、 \textcircled{a} あるいは \textcircled{s} という記号で表示する。 \oplus と \ominus はそれぞれ分子内の2つの電子の交換に関する対称性、非対称性を表し、また、 \textcircled{a} と \textcircled{s} はそれぞれ分子内の2つの原子核の交換に関する非対称性、対称性を表しており、回転準位間の遷移が生じるか否かの判別の指標となる。

回転準位間の遷移規則としては、

- (i) \oplus と \ominus との間で遷移は可能
- (ii) $|\Delta J| \leq 1$ を満足する遷移は可能
- (iii) \textcircled{a} と \textcircled{a} 、また、 \textcircled{s} と \textcircled{s} の間で遷移は可能

が満足されなければならない。 O_2 分子の場合には6つの主ブランチ ($P_1, P_2, P_3, R_1, R_2, R_3$) と8つのサテライト・ブランチ ($pQ_{12}, pQ_{23}, pR_{13}, rQ_{21}, rQ_{32}, rP_{31}, tR_{31}, nP_{13}$) が理論的に存在する。ただし、すべてのブランチが同一強度を有しているわけではない。 $\Lambda=0$ であり、かつ、同核より成る O_2 分子では、 $\textcircled{s}-\textcircled{s}$ 間遷移が $\textcircled{a}-\textcircled{a}$ 間遷移より強いという交互強度規則が成立するので、図2.3に示すように偶数番ブランチは欠落している。

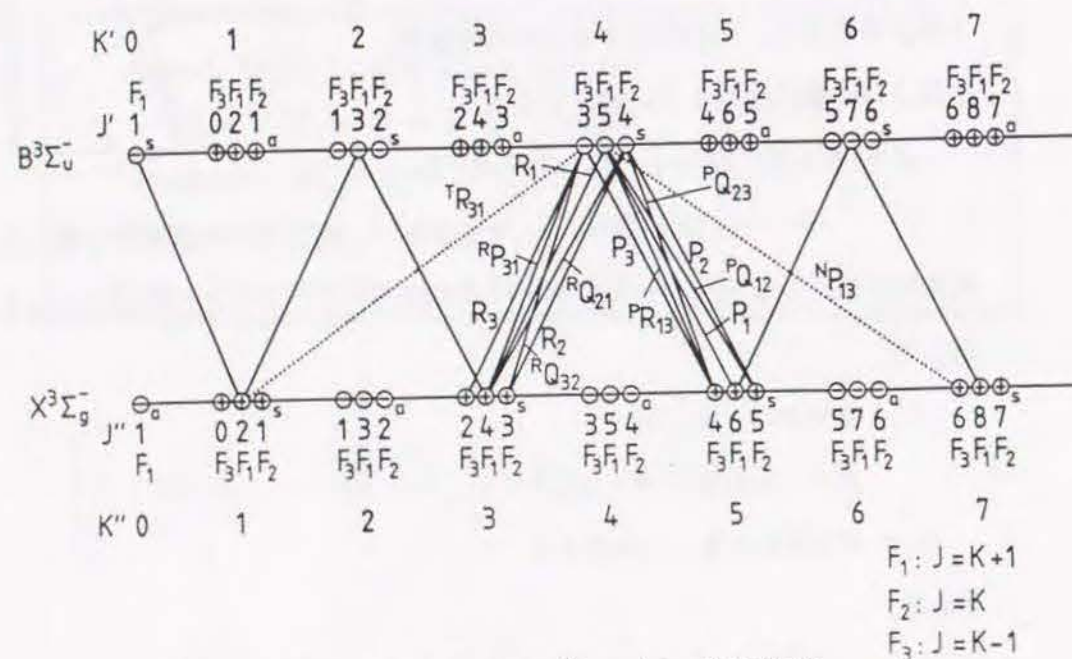


図2.3 シューマン・ルンゲ・バンドの構造

2.2.1.3 シューマン・ルンゲ・バンドのスペクトル計算式

(1) 準位間エネルギー差の式

回転遷移における準位間エネルギー差は一般的に次の公式で計算される。

$$T = [T_e' + G'(v') + F'(J')] - [T_e'' + G''(v'') + F''(J'')] \quad (2.4)$$

ここで、 T は準位間エネルギー差、 $G(v), F(v)$ はそれぞれ振動エネルギー準位、回転エネルギー準位を表す。

表2.2 振動準位エネルギーの公式の比較

Eq.	Formula	State	Constants	Ref.
G1	$G(v) = T_e + \omega_e(v + \frac{1}{2}) - \omega_e x_e(v + \frac{1}{2})^2 + \omega_e y_e(v + \frac{1}{2})^3$	$X^3\Sigma_g^-$	$T_e = 0$ $\omega_e = 1580.361$ $\omega_e x_e = 12.0730$ $\omega_e y_e = 0.546$	[M5]
G2	$G(v) = T_e + \omega_e(v + \frac{1}{2}) - \omega_e x_e(v + \frac{1}{2})^2$		$T_e = 0$ $\omega_e = 1580.2$ $\omega_e x_e = 12.0$	[M1]
G3	same as G1	$B^3\Sigma_u^-$	$T_e = 49802.9$ $\omega_e = 700.36$ $\omega_e x_e = 8.002$ $\omega_e y_e = -0.3753$	[M5]
G4	same as G2		$T_e = 49793.3$ $\omega_e = 709.3$ $\omega_e x_e = 10.6$	[M1]
G5	$G(v) = T_e + \omega_e(v + \frac{1}{2}) - \omega_e x_e(v + \frac{1}{2})^2 + \omega_e y_e(v + \frac{1}{2})^3 + \omega_e z_e(v + \frac{1}{2})^4 + \omega_e a_e(v + \frac{1}{2})^5$		$T_e = 49004.75$ $\omega_e = 709.56$ $\omega_e x_e = 10.92$ $\omega_e y_e = -0.0176$ $\omega_e z_e = -0.0180$ $\omega_e a_e = 0.00029$	[E3]
G6	using reference values	$X^3\Sigma_g^-$ $B^3\Sigma_u^-$	表2.4	[E4]

(2) 振動エネルギー準位の式 $G(v)$ の選定

振動準位エネルギーを表わすには、多項式がよく用いられる。表2.2に過去に提案された公式とそれに付随する分子定数をまとめて示す。図2.4に文献[E4]に報告された実験値と公式からの推算値との差を対比した。表2.2中の多項式 (G_1, G_2, \dots, G_5) は高い振動準位 ($v > 14$) になると差が大きくなる傾向があることがわかる。本研究では振動準位エネルギーとしては、実験値^[E4]を直接に参照することとする。

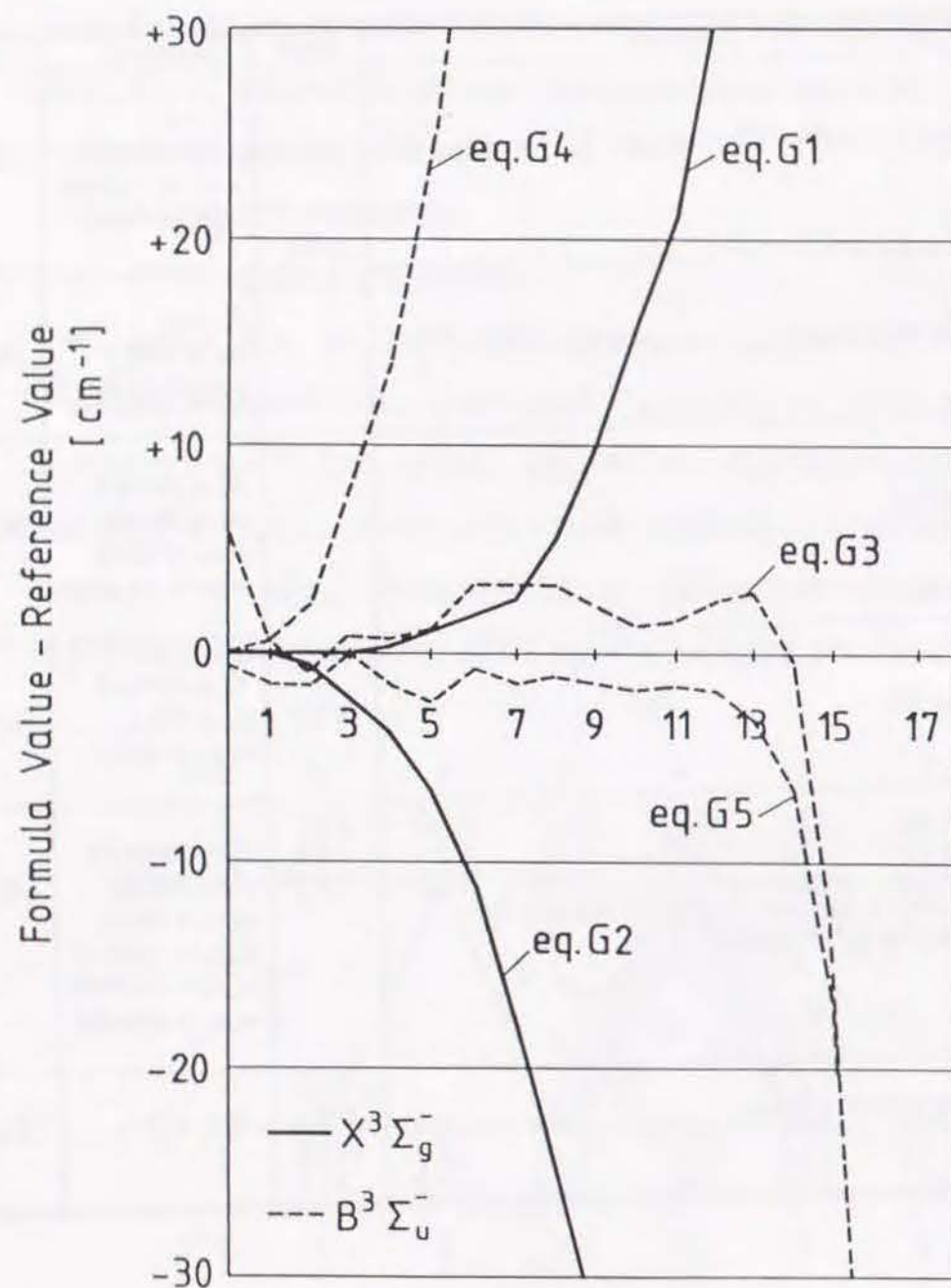


図2.4 振動準位エネルギー公式の評価結果

(3) 回転エネルギー準位の式 $F(J)$ の選定

回転準位エネルギーについても、多項式を用いることが多い。表2.3～2.5に過去に提案された公式とそれに付随する分子定数をまとめて示す。図2.5に $X^3\Sigma_g^-$ に対する文献[E9]に報告された値と公式からの推算値との差を比較して示す。 $B^3\Sigma_u^-$ 準位に対する実験値は見あたらないので、公式(表2.3中のF-3及びF-4)の精度は式(2.4)の結果を総合的に見て判定するものとする。

公式F-1は $K < 15$ においては精度が良いが、 K が大きくなるにしたがって精度が低下する。一方、公式F-2はすべての K について 2 cm^{-1} 以下の差にとどまるが、シューマン・ルンゲ・バンドの三重項構造を表現することが出来ない。

結論として、本論文では下位準位 ($X^3\Sigma_g^-$) に対しては基本的に公式F-1を用いて、別途誤差を補正し、また、上位準位 ($B^3\Sigma_u^-$) に対しては公式F-4を用いる。図2.5に示すように公式F-1を用いた場合、 $K < 40$, $v'' = 0, 1$ の範囲で F_1, F_2, F_3 に対する誤差はほとんど等しいから、本研究では以上の検討を踏まえて算出した補正值(表2.6)を F_1, F_2, F_3 全てに対して用いる。

表2.3 回転準位エネルギーの公式の比較

Eq.	Formula	State	Constants	Ref.
F-1	$F_1 = B_v K(K+1) + (2K+3)B_v - \lambda - \sqrt{(2K+3)^2 B_v^2 + \lambda^2 - 2\lambda B_v} + \gamma(K+1)$ $F_2 = B_v K(K+1)$ $F_3 = B_v K(K+1) - (2K-1)B_v - \lambda - \sqrt{(2K-1)^2 B_v^2 + \lambda^2 - 2\lambda B_v} + \gamma K$	$X^3\Sigma_g^-$	$\lambda = 1.984$ $\gamma = -0.0084$ $B, D: B_v, D_v$ in Table 4	
F-2	$F_1, F_2, F_3 = B_v K(K+1) - D_v K^2(K+1)^2$ $B_v = B_e - \alpha_e(v + \frac{1}{2})$ $D_v = 4B_e^3/\omega_e^2$		$B_e = 1.44566$ $\alpha_e = 0.01579$ $\omega_e = 1580.361$	[M5]
F-3			$B_e = 0.819$ $\alpha_e = 0.011$ $\omega_e = 700.36$	
F-4	$F_1 = (a_{11} + a_{22} - \sqrt{(a_{11} - a_{22})^2 + 4a_{12}a_{21}})/2$ $F_2 = Bx - Dx^2 + \frac{2}{3}\lambda - \gamma + \frac{2}{3}x\lambda_D - x\gamma_D$ $F_3 = (a_{11} + a_{22} + \sqrt{(a_{11} - a_{22})^2 + 4a_{12}a_{21}})/2$ $x = J(J+1)$ $a_{11} = B(x+2) - D(x^2+8x+4) - \frac{2}{3}\lambda - 2\gamma - \frac{2}{3}\lambda_D(x+2) - 4\gamma_D(x+1)$ $a_{12} = a_{21} = -2x^{1/2}(B - 2D(x+1) - \frac{2}{3}\lambda - \frac{2}{3}\lambda_D - 2\gamma - 2\gamma_D(x+4))$ $a_{22} = Bx - D(x^2+4x) + \frac{2}{3}\lambda - \gamma + \frac{2}{3}\lambda_D x - 3\gamma_D x$	$B^3\Sigma_u^-$	表2.5 (when $v \geq 18$, the values of $v = 17$ are used.)	[E3]

表2.4 X, B軌道に対する分子定数^[E4]

v	X ³ Σ _g ⁻			B ³ Σ _g ⁻		
	G _v	B _v	10 ⁴ D _v	G _v	B _v	10 ⁴ D _v
-1/2	-787.2 l	1.4456 d	4.78 kr	49006.3 m	0.820 i	4.60 kr
0	0	1.43771 a	4.854 is	49357.20 k	0.81379 a	4.659 g
1	1556.385 i	1.42196 a	4.957 is	50045.75 k	0.80051 a	4.875 g
2	3089.11 lt	1.4063 er	5.0 lr	50710.91 k	0.78628 b	5.089 h
3	4598.61 lt	1.3907 et	5.0 lr	51361.17 k	0.77156 b	5.349 i
4	6084.69 l	1.3755 d	5.049 k	51969.69 k	0.75678 o	5.967 j
5	7547.69 k	1.3604 d	5.145 k	52561.39 k	0.73860 c	6.258 j
6	8988.14 k	1.3443 d	5.006 k	53122.79 l	0.72184 d	7.116 k
7	10406.88 k	1.32857 o	4.953 j	53655.96 k	0.70114 d	7.740 k
8	11801.67 k	1.31311 o	4.900 j	54166.22 k	0.68032 d	8.778 k
9	13173.60 k	1.29776 b	5.012 i	54622.14 k	0.65348 d	9.161 k
10	14523.24 k	1.28221 b	4.990 i	55050.89 k	0.62632 d	10.39 k
11	15852.42 k	1.26610 b	4.951 i	55438.80 k	0.6019 f	20.0 pu
12	17156.66 k	1.25045 b	4.961 h	55784.63 k	0.5639 f	16.0 pv
13	18437.04 k	1.23526 b	5.028 h	56085.62 k	0.5243 o	16.4 pv
14	19695.20 k	1.21992 b	5.100 h	56340.60 k	0.4831 o	20.6 nv
15	20930.90 k	1.20410 b	5.134 h	56550.70 k	0.4396 o	25.8 nv
16	22143.10 k	1.18833 b	5.197 h	56719.66 k	0.3954 o	34.8 nv
17	23331.50 k	1.17205 b	5.290 h	56862.56 l	0.3463 g	43.7 pv
18	24497.11 k	1.15644 b	5.366 h	56954.57 l	0.2949 h	142.0 qv
19	25638.53 k	1.14012 b	5.454 h	57030.29 l	0.2544 h	31.2 qv
20	26755.46 k	1.12354 b	5.657 h	57082.89 l	0.2018 h	23.2 qv
21	27847.50 k	1.10681 b	5.711 h	57114.81 l	0.1567 h	85.4 qv
22	28914.05 k	1.08958 b	5.880 h			
23	29954.28 k	1.07202 b	6.094 h			
24	30967.58 k	1.05373 b	6.303 i			
25	31952.62 l	1.03502 o	6.648 j			
26	32908.26 l	1.01537 c	7.024 j			
27	33833.13 k	0.99427 o	7.362 j			
28	34724.78 l	0.97393 d	8.084 k			

(Error indicators: a, ±0.00001; b, ±0.00002; c, ±0.00005; d, ±0.0001; e, ±0.0002; f, ±0.0005; g, ±0.001; h, ±0.005; i, ±0.005; j, ±0.01; k, ±0.05; l, ±0.1; m, ±0.2; n, ±0.5; p, error uncertain; q, error very uncertain. Comments: r, interpolated or extrapolated; s, Babcock & Herzberg's (1948) measurements recalculated; t, Ogawa's (1966) measurements recalculated; u, Ackerman & Biau's (1970) measurements recalculated; v, Brix & Herzberg's (1964) measurements recalculated.)

表2.5 B軌道に対する分子定数^[E3]

Molecular Spectroscopic Constants (cm ⁻¹) of the B ³ Σ _g ⁻ State of O ₂ ⁺									
v'	T(v')	B	10 ⁴ D	λ	-γ	10 ⁴ λ ₀	-10 ⁴ λ ₀	RMS	
0	49 356.81 (0.03)	0.8132 (0.0003)	0.45 (0.06)	1.69 (0.03)	0.028 (0.001)			0.07	
1	50 844.37 (0.03)	0.7993 (0.0003)	0.42 (0.05)	1.70 (0.03)	0.026 (0.001)			0.08	
2	50 709.53 (0.02)	0.7860 (0.0002)	0.50 (0.03)	1.69 (0.02)	0.029 (0.001)			0.06	
3	51 350.78 (0.02)	0.7705 (0.0007)	0.52 (0.09)	1.70 (0.02)	0.026 (0.001)			0.10	
4	51 968.26 (0.11)	0.7527 (0.0009)	0.14 (0.13)	1.72 (0.02)	0.024 (0.001)			0.12	
5	52 559.75 (0.05)	0.7377 (0.0005)	0.58 (0.07)	1.75 (0.02)	0.022 (0.001)			0.16	
6	53 121.44 (0.07)	0.7187 (0.0003)	0.50 (0.13)	1.79 (0.02)	0.021 (0.001)			0.21	
7	53 654.72 (0.04)	0.7010 (0.0003)	0.06 (0.04)	1.82 (0.05)	0.021 (0.001)			0.13	
8	54 154.92 (0.09)	0.6776 (0.0006)	0.67 (0.07)	1.91 (0.02)	0.023 (0.001)			0.15	
9	54 611.12 (0.05)	0.6514 (0.0002)	0.63 (0.03)	2.04 (0.04)	0.021 (0.003)		0.22 (0.05)	0.09	
10	55 049.72 (0.04)	0.6263 (0.0002)	0.99 (0.02)	2.10 (0.04)	0.041 (0.002)			0.10	
11	55 437.75 (0.07)	0.5956 (0.0006)	0.94 (0.15)	2.17 (0.07)	0.038 (0.004)			0.17	
12	55 782.95 (0.02)	0.5626 (0.0002)	1.37 (0.02)	2.37 (0.02)	0.054 (0.002)		0.24 (0.04)	0.07	
13	56 083.68 (0.01)	0.5242 (0.0001)	1.63 (0.01)	2.51 (0.01)	0.084 (0.001)		0.26 (0.02)	0.03	
14	56 338.43 (0.01)	0.48319 (0.00008)	2.084 (0.009)	2.81 (0.02)	0.116 (0.001)	8.19 (0.04)	0.39 (0.02)	0.04	
15	56 548.26 (0.01)	0.4391 (0.0001)	2.54 (0.02)	3.38 (0.02)	0.164 (0.002)	0.31 (0.07)	0.66 (0.04)	0.04	
16	56 716.64 (0.02)	0.3934 (0.0002)	3.08 (0.03)	4.11 (0.03)	0.241 (0.003)	0.33 (0.1)	0.81 (0.06)	0.06	
17	56 848.65 (0.04)	0.3457 (0.0008)	3.34 (0.31)	5.18 (0.03)	0.348 (0.003)			0.07	

* Estimated errors, which are 1σ limits, are given in parentheses below the parameters. Parameters in parentheses have interpolated values.

表2.6 本論文の解析で用いるSchlappの公式に対する補正值

Quantum No. K	Correction Value [cm ⁻¹]
0	0
9	0.029
11	0.082
13	0.160
15	0.282
17	0.466
19	0.723
21	1.045
23	1.488
25	2.050
27	2.776
29	3.657
31	4.750
33	6.103
35	7.745
37	9.591
39	11.841
41	14.414
41 <	extrapolation

* The above table is used as follows:
(compensated value)=(original eq.) - (correction value)

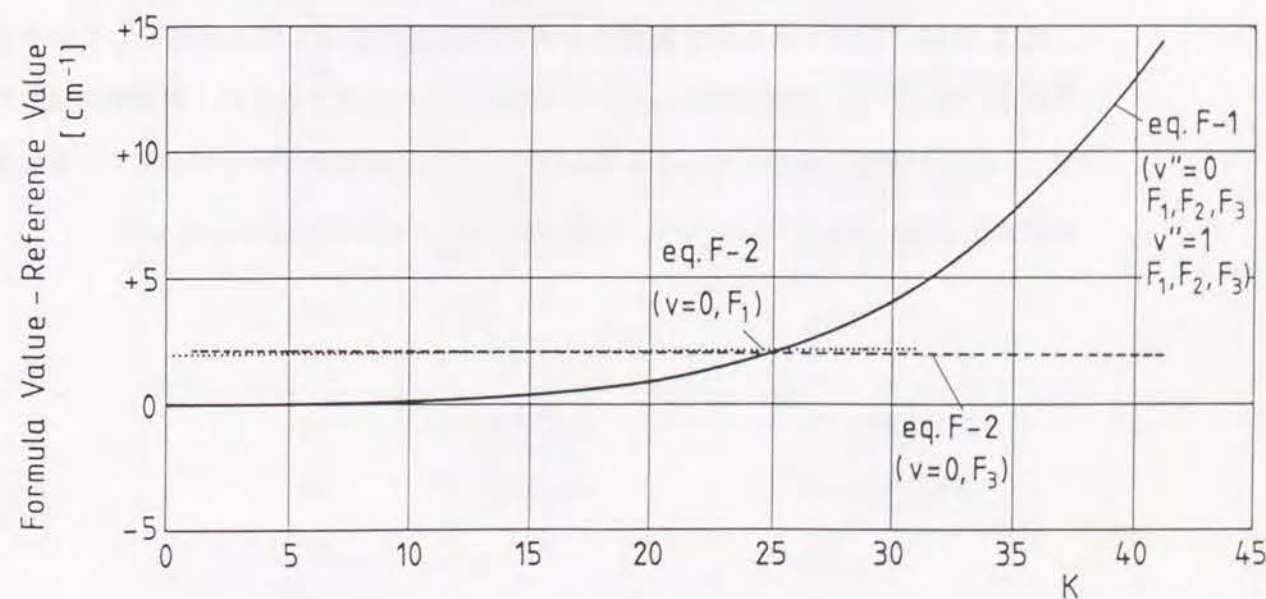


図2.5 回転準位エネルギー公式の評価結果

(4) バンドの強度分布

本研究におけるLIPF法では、レーザ光の吸収によって下位準位から上位準位へ励起される分子が再び下位準位へ自然放出する際の蛍光を測定するが、その際に測定されるスペクトル線の強度は下位準位から上位準位へ励起される分子数に比例するものと考えられる。したがってスペクトル線の強度は、振動遷移確率を意味するフランク・コンドン因子 $q_{v'v''}$ 、回転遷移確率を意味するヘーネル・コンドン因子 $S_{JJ'}$ 、及び、下位準位 $(X^3\Sigma_g^-)$ の振動・回転準位占有数密度 $N_{v''J''}$ に依存し、次の式で表現される。

$$I_{J'v'}^{v''} = \text{const.} \cdot q_{v'v''} \cdot S_{JJ'} \cdot N_{v''J''} / (2J'' + 1) \quad (2.5)$$

ここで、気体が熱平衡にある場合には、下位準位の振動・回転準位占有数密度はボルツマン分布になっているものと近似すれば

$$N_{v''J''} = \frac{(2J'' + 1) \exp(-G''(v'')/kT_{\text{vib}}) \exp(-F''(J'')/kT_{\text{rot}})}{Q} \quad (2.6)$$

である。ここで、 $G''(v'')$, T_{vib} , $F''(J'')$, T_{rot} , Q はそれぞれ、振動準位エネルギー、振動温度、回転準位エネルギー、回転温度、分配関数を表わしている。分配関数 Q は、

$$Q = \sum (2J'' + 1) \cdot \exp\left(-\frac{G''(v'')}{kT_{\text{vib}}}\right) \cdot \exp\left(-\frac{F''(J'')}{kT_{\text{rot}}}\right) \quad (2.7)$$

で表現される。(2.7) 式中の Σ はすべての振動・回転準位についての総和をとることを意味する。なお、式(2.6)では、振動温度と回転温度が独立に定式化されている。フランク・コンドン因子、ヘーネル・コンドン因子は表2.7及び表2.8に示した。

式(2.6)は、回転エネルギーと振動エネルギーが独立にボルツマン分布をしているという仮定に基づいて、文献[M2]にしたがって定式化された式であるが、希薄気体流れ中でこの仮定が厳密に成立しているか否かについては、研究例が十分ではなく、また他の定式化方法もみあたらないので、本研究では式(2.6)を用いることとした。

表2.7 シューマン・ルンゲ・バンドのフランク・コンドン因子 [E5]

HAR. FRANK-CONDON FACTORS FOR O₂ (S-R) SYSTEM^a

v''	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
0	3.547-9	1.021-7	1.430-6	1.283-5	8.204-5	4.067-4	1.604-3	5.146-3	1.362-2	5.038-2	5.765-2	9.277-2
1	3.489-8	9.090-7	1.142-5	9.071-5	5.105-4	2.167-3	7.164-3	1.875-2	5.910-2	4.557-2	4.657-2	4.593-2
2	2.143-7	5.059-6	5.697-5	4.005-4	1.963-3	7.104-3	1.951-2	4.087-2	6.457-2	7.475-2	5.774-2	2.167-2
3	9.155-7	1.958-5	1.979-4	1.231-3	5.243-3	1.610-2	5.623-2	5.900-2	6.621-2	4.494-2	1.080-2	1.697-2
4	2.914-6	5.680-5	5.161-4	2.842-3	1.049-2	2.710-2	4.904-2	5.936-2	4.172-2	9.856-3	2.095-3	2.861-3
5	7.665-6	1.361-4	1.113-3	5.419-3	1.726-2	3.713-2	5.256-2	4.572-2	1.390-2	4.503-2	2.222-2	3.847-2
6	1.753-5	2.811-4	2.071-3	8.921-3	2.445-2	4.323-2	4.603-2	2.261-2	5.668-2	1.264-2	3.386-2	1.985-2
7	3.498-5	5.198-4	3.458-3	1.317-2	3.092-2	4.420-2	3.328-2	6.546-3	3.409-3	2.597-2	2.552-2	2.222-2
8	6.299-5	8.594-4	5.173-3	1.744-2	3.488-2	3.942-2	1.881-2	1.396-2	1.355-2	2.764-2	9.543-3	2.026-3
9	1.008-4	1.269-3	6.938-3	2.074-2	3.527-2	3.072-2	7.566-3	2.089-3	2.092-2	1.906-2	6.325-3	1.153-3
10	1.477-4	1.724-3	8.606-3	2.292-2	3.306-2	2.145-2	1.590-3	7.528-3	2.197-2	8.797-3	1.391-3	1.293-3
11	1.963-4	2.136-3	9.789-3	2.331-2	2.847-2	1.314-2	1.057-3	1.218-2	1.776-2	2.101-3	6.459-3	1.687-3
12	2.309-4	2.449-3	1.058-2	2.225-2	2.307-2	7.126-3	9.339-4	1.417-2	1.190-2	2.047-3	1.045-2	1.161-2
13	2.699-4	2.664-3	1.018-2	2.002-2	1.768-2	3.355-3	2.570-3	1.361-2	8.770-3	6.809-4	1.152-2	6.186-3
14	2.807-4	2.580-3	9.579-3	1.711-2	1.299-2	1.339-3	5.813-3	1.155-2	3.330-3	2.051-3	1.027-2	2.572-3
15	2.723-4	2.403-3	8.468-3	1.405-2	9.288-3	4.292-4	4.325-3	9.058-3	1.430-3	3.014-3	8.083-3	7.935-4
16	2.481-4	2.118-3	7.151-3	1.115-2	6.523-3	9.268-4	4.214-3	6.749-3	5.290-4	3.323-3	5.901-3	1.417-4
17	2.125-4	1.766-3	5.764-3	8.542-3	4.505-3	5.822-4	3.694-3	4.838-3	1.609-4	5.110-3	4.101-3	1.467-4
18	1.736-4	1.414-3	4.495-3	6.402-3	3.101-3	3.486-4	3.029-3	3.410-3	3.630-3	2.643-3	2.793-3	2.395-3
19	1.349-4	1.082-3	3.371-3	4.658-3	2.110-3	1.686-4	2.342-3	2.354-3	3.884-4	2.085-3	1.867-3	6.360-4
20	8.805-5	6.991-4	2.147-3	2.905-3	1.253-3	2.134-4	1.519-3	1.410-3	3.432-4	1.367-3	1.090-3	4.998-4
21	1.275-4	1.504-4	1.519-4	1.520-4	9.974-5	6.595-5	3.823-4	1.934-4	8.476-5	3.738-4	1.131-3	3.809-4
22	5.850-5	1.979-4	1.965-5	1.946-5	6.821-5	1.143-4	1.311-4	1.150-4	8.112-5	4.730-4	2.581-4	1.090-4
23	9.873-5	1.816-4	5.757-5	7.123-5	4.128-4	4.670-5	8.838-5	5.537-4	1.035-4	1.185-4	1.016-4	7.286-5
24	2.948-5	3.375-4	3.585-5	3.265-5	1.161-4	5.294-5	6.424-4	2.838-4	1.855-4	2.270-4	7.705-5	1.247-4
25	4.309-5	1.959-4	9.664-5	2.553-4	5.000-4	2.562-4	1.648-4	2.713-4	6.181-4	4.458-4	5.579-5	1.261-4
26	1.650-4	4.180-4	2.567-4	3.905-4	1.042-3	4.610-4	3.960-4	4.045-4	5.218-4	1.083-3	5.024-4	5.055-4
27	1.098-4	1.925-4	3.309-4	7.831-4	5.859-4	3.550-4	2.465-4	2.003-4	2.607-4	4.437-4	1.291-4	4.858-4
28	1.018-4	2.951-4	1.079-4	2.827-4	2.883-4	2.053-4	9.678-5	2.601-4	2.260-4	2.565-4	1.487-4	4.147-4
29	2.289-4	3.683-4	5.783-4	2.006-4	2.179-4	1.948-4	1.907-4	2.695-4	1.271-4	1.495-4	3.355-4	5.264-4
30	2.132-4	2.657-4	8.799-4	2.279-4	3.439-4	9.290-5	2.484-4	3.387-4	1.111-4	2.883-4	5.038-4	1.004-4
31	1.125-4	6.030-4	1.759-4	1.120-4	1.162-4	2.006-4	9.571-5	3.071-4	2.386-4	8.444-4	4.573-4	2.537-4
32	2.768-4	6.118-4	1.647-4	1.611-4	9.065-4	1.609-4	1.835-4	1.450-4	1.432-4	2.637-4	1.898-4	1.171-4
33	1.355-4	1.045-4	9.782-4	3.356-4	1.375-4	6.591-4	2.856-4	1.642-4	2.548-4	8.232-4	1.718-4	3.825-4
34	1.061-4	1.161-4	3.783-4	3.265-4	1.222-4	9.511-4	8.039-4	1.040-4	1.833-4	1.378-4	6.924-4	2.688-4
35	2.952-4	9.549-4	7.701-4	5.831-4	7.986-4	8.035-4	9.805-4	4.176-4	3.015-4	1.200-4	8.901-4	7.740-4
36	4.109-4	6.758-4	7.226-4	6.552-4	4.254-4	1.163-3	8.507-4	9.585-4	5.448-4	7.475-4	1.145-4	9.114-4
37	4.315-4	4.341-4	1.808-4	5.920-4	1.939-4	2.188-4	6.180-4	4.037-4	5.980-4	3.763-4	1.228-4	7.607-4
38	3.866-4	2.647-4	4.926-4	4.716-4	7.722-4	2.555-4	4.056-4	8.117-4	5.216-4	1.618-4	2.128-4	5.319-4
39	3.166-4	1.588-4	6.641-4	3.517-4	2.737-4	2.414-4	2.549-4	2.938-4	4.060-4	6.205-4	2.371-4	3.425-4
40	2.424-4	9.462-4	6.741-4	2.502-4	8.452-4	2.010-4	1.565-4	4.135-4	2.942-4	2.130-4	2.142-4	2.112-4
41	1.555-4	5.029-4	5.107-4	1.521-4	2.048-4	1.354-4	8.478-4	3.637-4	1.801-4	6.051-4	1.506-4	1.138-4

^aNegative digit refers to power of ten; e.g., read 3.547-9 as 3.547×10^{-9}

表2.8 $3\Sigma^+ - 3\Sigma^+$ 遷移に対するヘーネル・コンドン因子 [E6]

P_1	$\frac{J'(2J'+3)}{2J'+1}$	$\frac{(J''-1)(2J''+1)}{2J''-1}$
K_1	$\frac{(J'-1)(2J'+1)}{2J'-1}$	$\frac{J''(2J''+3)}{2J''+1}$
${}^rR_{11}$	$\frac{1}{J'(2J'-1)(2J'+1)}$	$\frac{1}{(J''+1)(2J''+1)(2J''+3)}$
${}^rQ_{11}$	$\frac{1}{J'}$	$\frac{1}{J''}$
P_2	$\frac{J'(J'+2)}{J'+1}$	$\frac{(J''-1)(J''+1)}{J''}$
R_2	$\frac{(J'-1)(J'+1)}{J'}$	$\frac{J''(J''+2)}{J''+1}$
${}^rQ_{12}$	$\frac{1}{J'+1}$	$\frac{1}{J''+1}$
${}^sQ_{11}$	$\frac{1}{J'}$	$\frac{1}{J''}$
P_3	$\frac{(J'+2)(2J'+1)}{2J'+3}$	$\frac{(J''+1)(2J''-1)}{2J''+1}$
R_3	$\frac{(J'+1)(2J'-1)}{2J'+1}$	$\frac{(J''+2)(2J''+1)}{2J''+3}$
${}^sQ_{12}$	$\frac{1}{J'+1}$	$\frac{1}{J''+1}$
${}^sP_{11}$	$\frac{1}{(J'+1)(2J'+1)(2J'+3)}$	$\frac{1}{J''(2J''-1)(2J''+1)}$

(5) スペクトル形状

O_2 -LIPFを用いた測定で得られる蛍光スペクトル形状は、自然幅、ドップラ幅、衝突幅などの O_2 分子の物理的状态から生ずる幅と励起用レーザの線幅、蛍光信号の平均化区間の幅などの測定系の特性から生ずる幅の影響を受ける。したがって、これらの幅の回転スペクトル形状に及ぼす影響を予め検討しておくことは必要である。

(i) 理想スペクトル形状

自然幅すなわち前期解離線幅の半値全幅(FWHM)^[E11]とドップラ幅を比較すると図2.6に示すようにドップラ幅は並進温度 T_{tr} が高くなる程大きくなるものの、並進温度1000K以下であれば、前期解離線幅が支配的である^[A9]。衝突幅は希薄域では無視できる程小さい。そこで本研究ではドップラ幅及び衝突幅を無視して計算を行う。式(2.5)によって求まるスペクトル線の強度 $I_{J'J''}^{v'v''}$ を用いて、前期解離線幅の影響を考慮したスペクトル形状 I_{ideal} はローレンツ形関数により次のように定められる。

$$I_{ideal}(\nu) = \sum_{i=1} \frac{I_{J'J''}^{v'v''} \cdot \Delta\nu_{PDi}}{2\pi \left\{ (\nu - \nu_{oi})^2 + (\Delta\nu_{PDi}/2)^2 \right\}} \quad (2.8)$$

ν_{oi} , $\Delta\nu_{PDi}$, i はそれぞれスペクトル線幅の中心周波数、前期解離線幅、レーザ波長掃引域に現れる i 番目の回転スペクトル線を表している。以下ではスペクトル形状を式(2.8)に基づいて求める。

(ii) 現実のスペクトル形状

励起用レーザの線幅が無限小である場合には、レーザ波長を掃引することによ

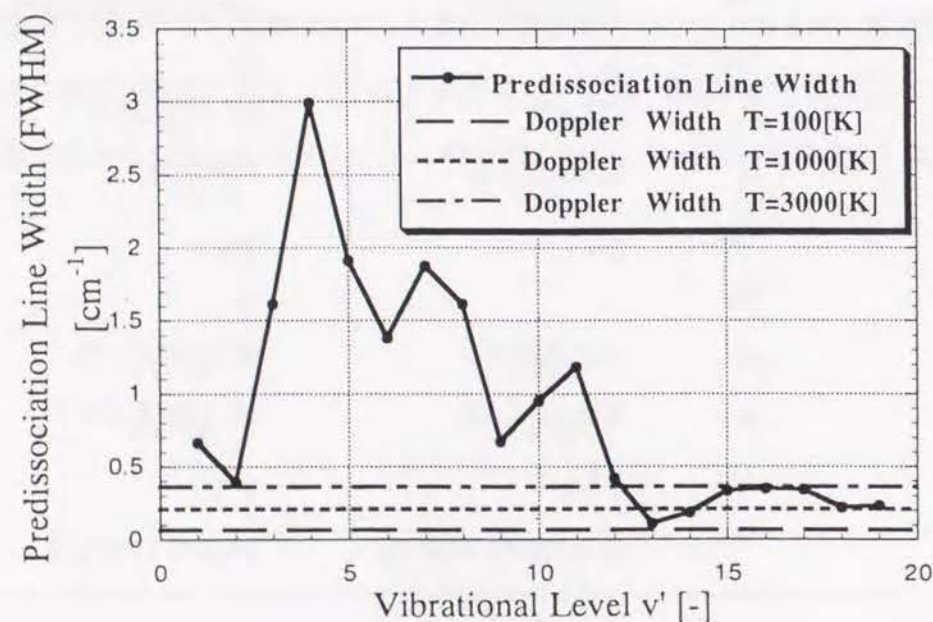


図2.6 ドップラ幅と前期解離線幅

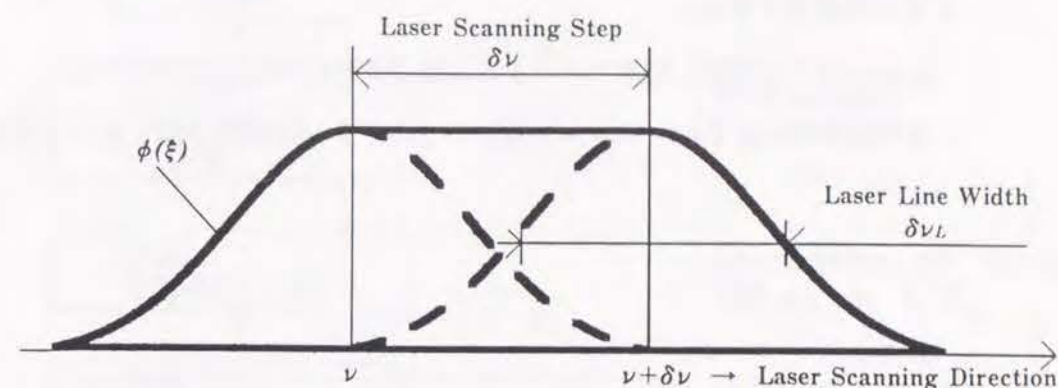


図2.7 重み関数の形状

て、式(2.8)で示されるスペクトル形状が得られる。しかし、実際には励起用レーザの半値全幅 $\delta\nu_L$ 、蛍光信号を積算平均化する区間の幅(レーザ掃引波長ステップ幅) $\delta\nu$ は有限であるので、実際には式(2.8)を重みづけ平均したスペクトル形状が得られる。

狭帯域化されたレーザの強度分布をガウス分布と近似する^[D20]と、重み関数 $\phi(\xi)$ (図2.7)は、 ϕ_0 を任意定数として

$$\phi(\xi) = \begin{cases} \phi_0 \cdot \exp\left[-\left\{\frac{2(\xi - \nu)}{\delta\nu_L}\right\}^2 \ln 2\right] & [\xi < \nu] \\ \phi_0 & [\nu \leq \xi \leq \nu + \delta\nu] \\ \phi_0 \cdot \exp\left[-\left\{\frac{2(\xi - (\nu + \delta\nu))}{\delta\nu_L}\right\}^2 \ln 2\right] & [\nu + \delta\nu < \xi] \end{cases} \quad (2.9)$$

で表現される。レーザ掃引波長ステップ区間 $[\nu, \nu + \delta\nu]$ における蛍光強度 I_{exp} は、

$$I_{exp}(\nu) = \frac{1}{\delta\nu} \int_{-\infty}^{\infty} I_{ideal}(\xi) \phi(\xi) \delta\xi \quad (2.10)$$

で計算される。

式(2.10)で計算されるスペクトル形状は、実験で得られるスペクトル形状に対応しており、本論文第3章で具体例に則して詳細に検討する。

2.2.1.4 計算コード

スペクトルシミュレーション法のアルゴリズムについて述べる。本節では O_2 分子を具体的な対象として述べるが、第4章、第5章で取り扱う I_2 分子についても同様のアルゴリズムが適用できる。

Appendix 3 に記載した本プログラムはMS-FORTRANで記述されている。

本プログラムのフローチャート及びサブルーチンの構成を図2.8(1)、図2.8(2)に示す。

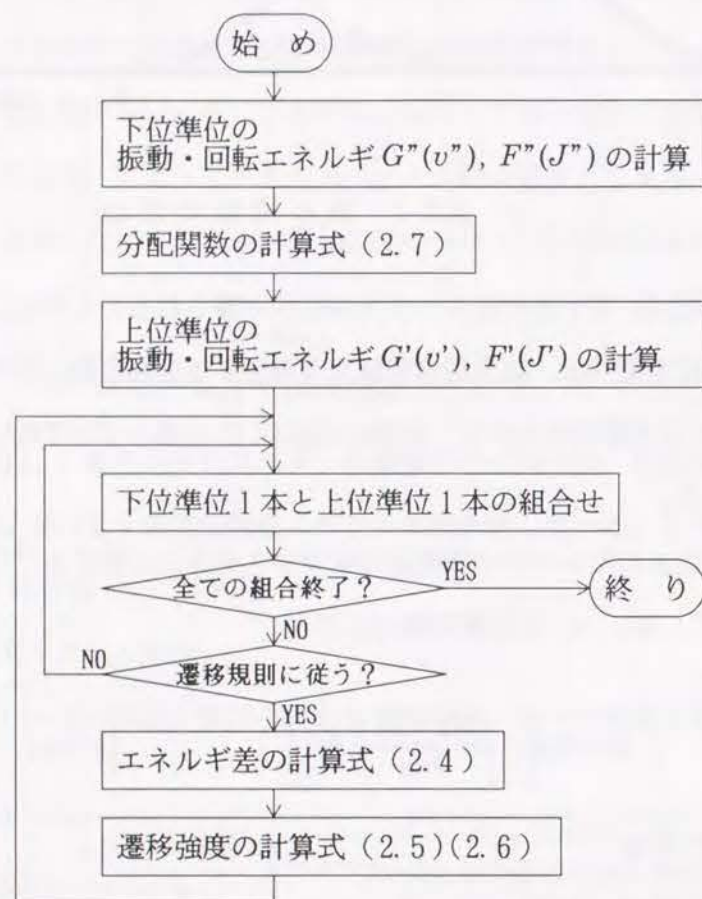


図2.8(1) スペクトル・シミュレーションの基本アルゴリズム

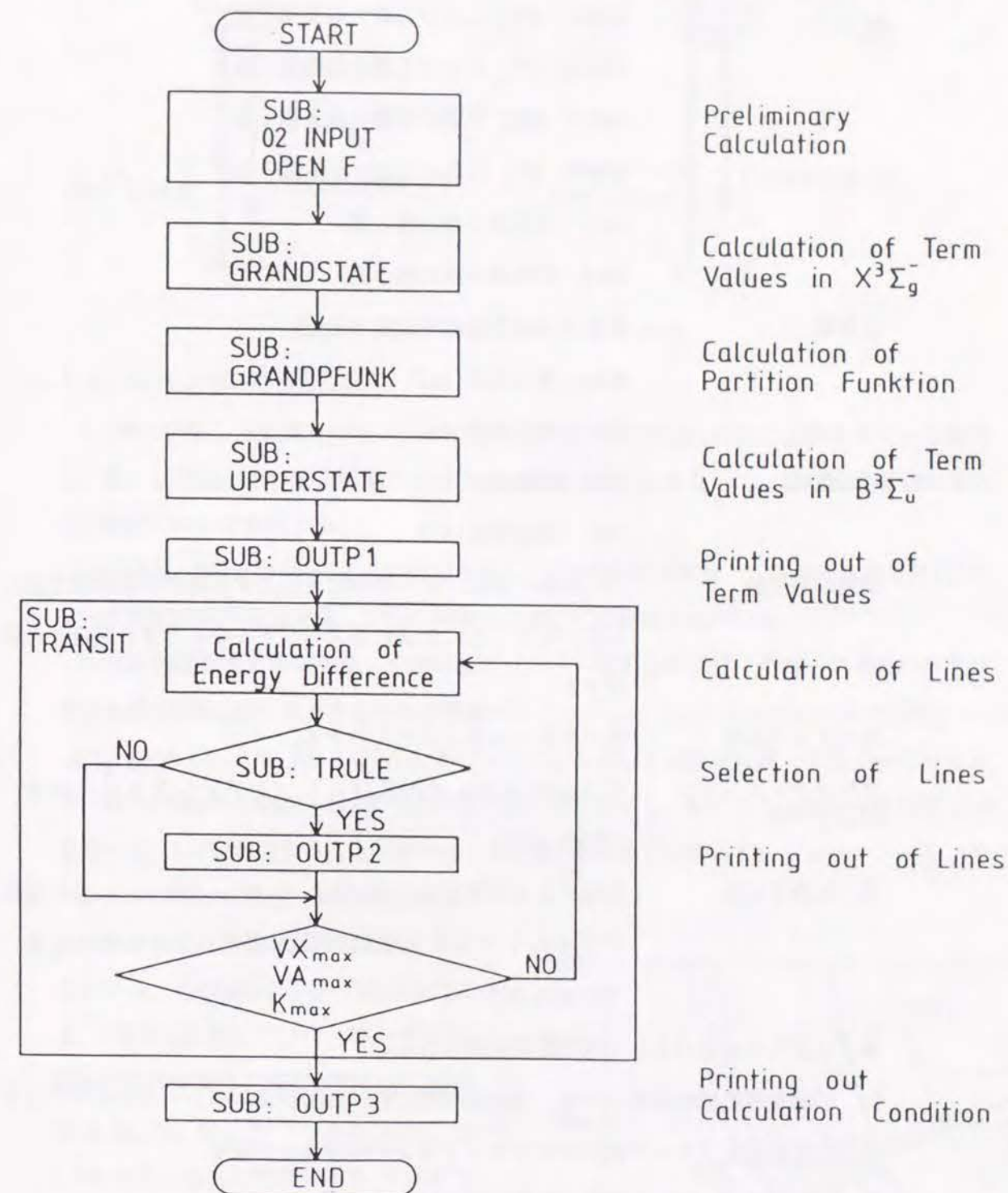


図2.8(2) シューマン・ルンゲ・バンド・シミュレーションのサブルーチン構成

データとして次の量を入力する必要がある。

量子数	: 振動量子数, 回転量子数の範囲を設定する。
	VXMAX ($X^3\Sigma_g^-$ における最大振動量子数)
	VXMIN ($X^3\Sigma_g^-$ における最小振動量子数)
	VAMAX ($B^3\Sigma_u^-$ における最大振動量子数)
	VAMIN ($B^3\Sigma_u^-$ における最小振動量子数)
	KMAX (回転量子数の最大値)
	KMIN (回転量子数の最小値)
波長域	: 計算する波長領域を設定する。
	WLMAX (最大波長[nm])
	WLMIN (最小波長[nm])
ガス温度	: TVIB (振動温度[K])
	TROT (回転温度[K])
出力制御変数	: ITA (振動・回転エネルギー準位を出力する場合 1 と設定する)
	ITB (バンドごとに含まれるスペクトルを出力する場合 1 と設定する)
出力ファイル名	: 出力先をフルネームで入力する。
フランク・コンドン因子データ	: デフォルトファイル名はカレントディレクトリにある 'O2FCF.DAT'
B_v, D_v 分子定数	: 回転エネルギー準位を計算するためのデータファイル名を指定。 デフォルトファイル名はカレントディレクトリにある 'BDCONST.DAT'

本プログラムの出力として次の結果が得られる。

- 振動温度と回転温度の平衡, 非平衡状態に於ける O_2 シューマン・ルンゲ・バンドに含まれる主ブランチ及びサテライトブランチの波長及び強度
- $X^3\Sigma_g^-$ 及び $B^3\Sigma_u^-$ に対する振動及び回転エネルギー準位
- スペクトルのグラフィック像
- バンドグループごとのスペクトルリスト, 及び, 波長順にならべたスペクトル線リスト

LIF

LIPF

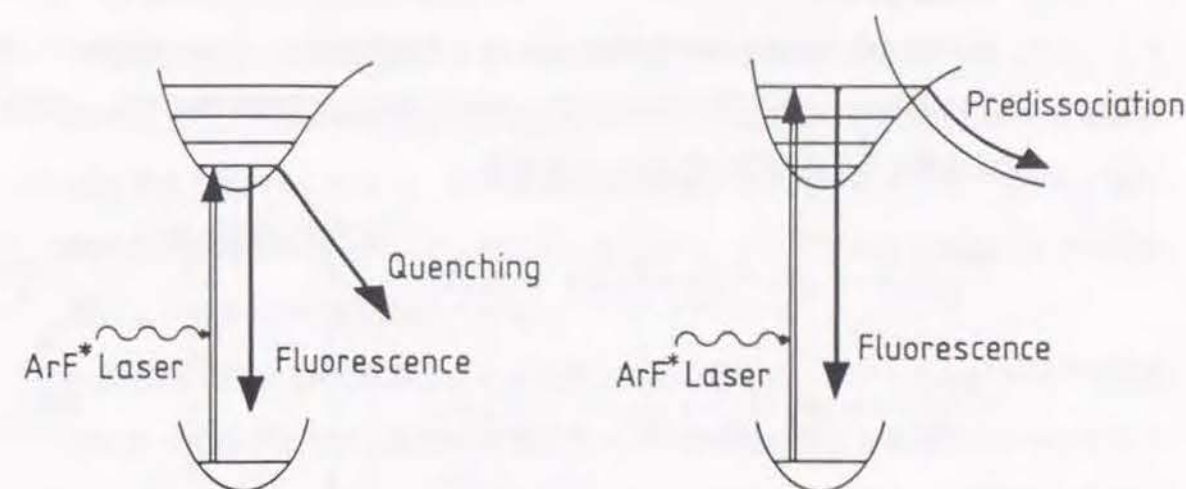


図2.9 LIFとLIPFの相違

2.2.2 O_2 -LIPFの使用圧力域

2.1節に記載した本研究の狙い(1)に関連して, O_2 -LIPF法がLIF法と区別されている理由と, O_2 -LIPF法が広い圧力範囲で有用である理由を明らかにし, O_2 -LIPF法の適切な適用圧力範囲について検討する。

LIPF法は, Massey^[F3]によって提案されたLIFの特殊例であり, レーザ誘起蛍光法(LIF), レーザ誘起前期解離蛍光法(LIPF)の詳細は文献[F4]に解説されている。

O_2 は約10種類あまりの主要な光学的遷移バンドを有するが^[E1], それらの遷移バンドの中でも最もLIFに適すると考えられる遷移バンドはシューマン・ルンゲ・バンド($B^3\Sigma_u^- \longleftrightarrow X^3\Sigma_g^-$)である。このバンドは175nmをバンドヘッドとして可視域に渡って広く分布しており, 特に175nmから約200nmの紫外波長域で強い吸収を示し, ArF*エキシマレーザ(193.4nm)を用いて, LIFを適用することが出来る。図2.9に遷移モデルを示す。シューマン・ルンゲ・バンドを利用する場合, 前期解離(Predissociation)の影響が顕著に現れて来る

ことから, その場合のレーザ誘起蛍光法を, LIFとは区別してLIPFと呼んでいる。図2.10に示すように前期解離を生じる軌道は $5\Pi_u, 3\Pi_u$ など^[E10]であり, LIPFにはLIFにはない有利な特徴がある。すなわち, 分子間の衝突が生じる前に前期解離してしまうので, クエンチングの影響が生じにくく, 励起分子数と蛍光強度の線型関係が広い数密度範囲にわたって保証されるという特徴である。そこで, 次に前期解離の効果について定量的に検討する。

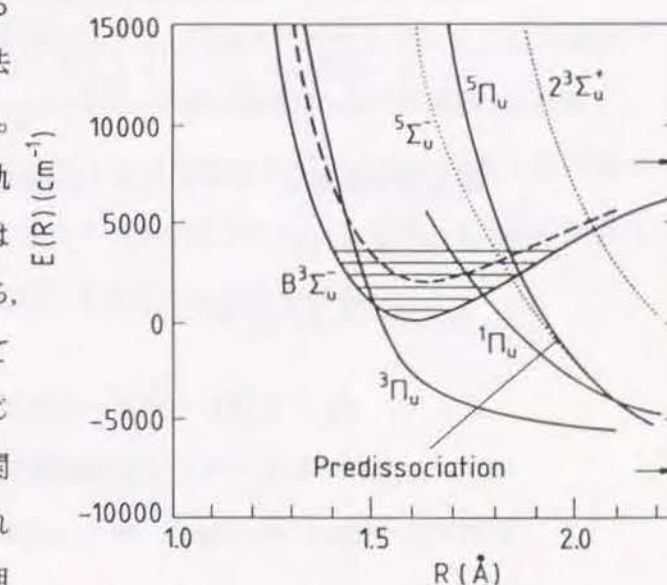


図2.10 O_2 の上位準位の前期解離準位^[E10]

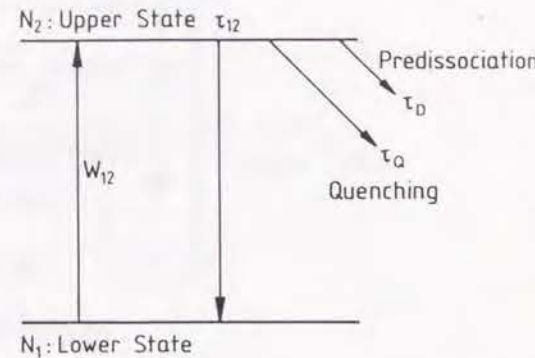
(1) 蛍光信号のモデル

図2.11に示した蛍光強度計算モデルに従って計算を行う。いま、簡易的に二準位モデルによる、レート方程式を用いて O_2 -LIPFの蛍光強度特性を検討する。下位準位と上位準位の分子数密度の変化は、それぞれ

$$\frac{d(N_1)}{dt} = -W_{12}N_1 + \left(\frac{1}{\tau_{12}} + W_{12}\right)N_2 \quad (2.11)$$

$$\frac{d(N_2)}{dt} = W_{12}N_1 - \left(\frac{1}{\tau_{12}} + \frac{1}{\tau_D} + \frac{1}{\tau_Q} + W_{12}\right)N_2 \quad (2.12)$$

と表現される。



ここで、 τ_{12} : 自発放出寿命 $\approx 10^{-5}$ s 図2.11 蛍光信号解析の二準位モデル

τ_Q : 衝突時間 (気体の数密度に依存する)

τ_D : 前期解離時間 $\approx 10^{-11}$ s

W_{12} : 遷移確率 $\approx 10^7$ s $^{-1}$

これらの方程式は文献[E12]に基づいて定式化した。分子間衝突によるクエンチング効果が明確になるように衝突項を付加した。式(2.11)(2.12)の解析解を示すと、

$$\frac{N_1}{g_1} = \frac{N_{10}/g_1}{\lambda_1 - \lambda_2} \{ -(\lambda_2 + W_{12})\exp(\lambda_1 t) + (\lambda_1 + W_{12})\exp(\lambda_2 t) \} \quad (2.13)$$

$$\frac{N_2}{g_2} = \frac{(N_{10}/g_1)(\lambda_1 + W_{12})(\lambda_2 + W_{12})}{(\lambda_1 - \lambda_2)\left(\frac{1}{\tau_{12}} + W_{12}\right)} \{ -\exp(\lambda_1 t) + \exp(\lambda_2 t) \} \quad (2.14)$$

である。ここで、 λ_1, λ_2 は微分方程式の固有値であり、次式で示される。

$$\lambda_{1,2} = \frac{-\left(2W_{12} + \frac{1}{\tau_{12}} + \frac{1}{\tau_D} + \frac{1}{\tau_Q}\right) \pm \sqrt{4W_{12}^2 + \left(\frac{1}{\tau_{12}} + \frac{1}{\tau_D} + \frac{1}{\tau_Q}\right)^2 + \frac{4W_{12}}{\tau_{12}}}}{2} \quad (2.15)$$

蛍光信号強度は、レーザパルス持続時間 τ_P 内に生ずる蛍光光子の数として定義され、次式で計算される。

$$S_f = A_L \cdot L \int_0^{\tau_P} \frac{N_2}{\tau_{12}} dt \quad (2.16)$$

ここで、 A_L 、 L はレーザビーム断面積及びビームの観測長を示す。以下の検討において、ArF*エキシマレーザを励起光源として用いるものと想定し、 τ_P 、 A_L 、 L をそれぞれ ≈ 20 ns、 ≈ 125 mm 2 、 ≈ 1 cmであるとして検討を進める。

(2) 蛍光光子数 S_f の時間的变化

図2.12に式(2.13)(2.14)によって計算されるレーザ照射後の上位準位($B^3\Sigma_u^-$)と下位準位($X^3\Sigma_g^-$)の占有数密度の時間変化を示す。上位準位の数密度 N_2 はレーザ照射後より増大し始める。しかし、前期解離時間に到達すると N_2 はもはや増大せず、励起個数と前期解離個数とがバランスして一定となり、レーザ照射終了時間以降は前期解離によってすみやかに N_2 は0となる。

図2.13に式(2.16)で計算される全蛍光光子数を示した。クエンチングが分子間の衝突によって生ずるものと近似的に考えると、前期解離が生じる場合でもクエンチングの影響によって、 N_2 に比例する蛍光光子数 S_f と流れ場の数密度 N_1 との線型性が失われる。すなわち、 $\tau_D \approx 10^{-11}$ sとするとき、式(2.12)右辺第2項の係数の中で平均自由時間 τ_Q が前期解離時間 τ_D と同一オーダー以下となる場合、すなわち、 $\tau_Q < 10^{-11}$ sとなる場合には N_1 と N_2 の線型関係が失われる。蛍光光子数と流れ場の数密度との線型関係が失われると、蛍光スペクトルに現れる回転スペクトル線の相対強度比から流れ場の温度を計測する精度が著しく低下する。しかし、線型性が失われる条件は室温の O_2 では約 10^6 Pa以上に相当するので、かなり高圧までクエンチングの影響を受けることなく O_2 -LIPFが適用できる。一方、もし前期解離がなければ、 $\tau_D = \infty$ であるからクエンチングの影響は $\tau_Q < 1/W_{12}$ となる場合、すなわち、 10^2 Pa以上から現われ始めることになる。すなわち、適用圧力範囲の点で前期解離に着目するLIPF法は有利である。

ただし、この線型性の保持は利点ばかりとは云えない面がある。すなわち、図2.13に示すように蛍光信号強度は3オーダー程度低下するので、特に希薄な領域の計測を行う場合などでは、蛍光信号強度が小さく測定系の信号検出限界を下まわってしまうことが懸念される。したがって、信号検出限界は、実験的に把握しておくことは重要なことである。Laufer^[F12, F14]は O_2 -LIPFの信号検出限界について実験的に検討し、密度計測は圧力が 3×10^3 Pa以上で可能であると報告しているが、次第3章で述べる実験では圧力1Paレベルにおけるスペクトルが得られているので、信号検出限界は流れの温度、圧力条件などによって変化するものと考えられる。

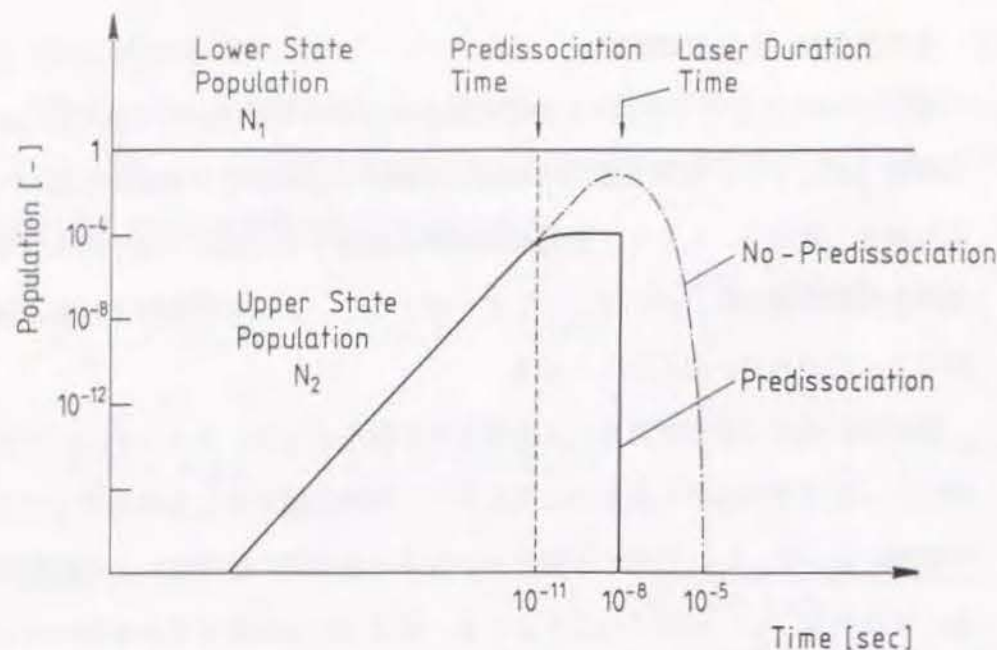


図2.12 上位準位及び下位準位の数密度時間変化解析結果

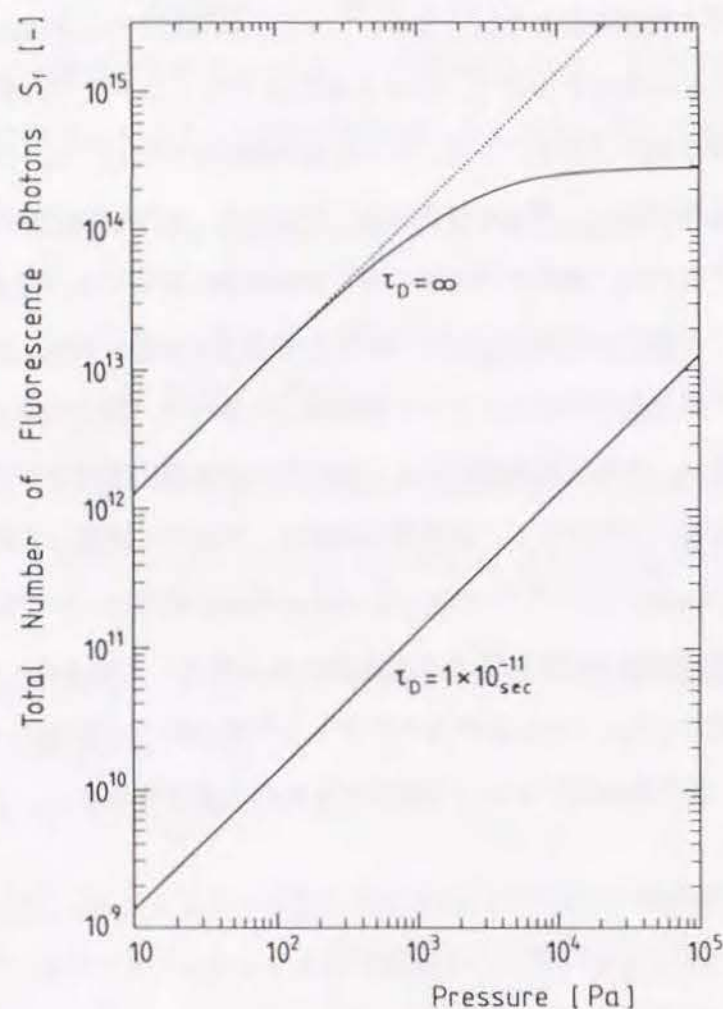


図2.13 LIPFにおける前期解離効果の解析結果

2.3 シューマン・ルンゲ・バンドのスペクトルシミュレーション結果

2.3.1 計算コードの精度の確認

先に説明した計算コードに従って求めたスペクトルシミュレーション結果(Appendix 4)に基づいて、表2.9にArF*エキシマレーザの掃引波長域(192.8~193.9nm)に存在する主要なスペクトル線を示す。なお、この表中には主ブランチのみが示してある。サテライト・ブランチの強度は主ブランチに比べて弱いので実質的に無視しても實際上問題ない。

Appendix 4に示されるスペクトルシミュレーション結果にはArF*エキシマレーザ掃引波長域に存在するほぼすべてのブランチ(サテライト・ブランチも含む)が表示されている。計算結果の精度を調べるために $v''=0$ 及び $v''=1$ からの遷移エネルギー値について比較する。図2.14及び図2.15に本計算結果を文献[E7, E8]に記載されている実験値と比較して示した。図2.14ではオリジナルのSchlappの式(F-1, 表2.3)と表2.6を用いた修正を施したSchlappの式双方の結果を比較して示している。両方の式は平均的に $+1\text{cm}^{-1}$ 程度の誤差を有しているが、本研究の修正式による値の方が文献[E7, E8]で報告された実験値との差に関して、広い回転準位域で一様、かつ、高位の回転準位でより正確であると判断される。

図2.16及び図2.17に $T_{\text{vib}} = T_{\text{rot}} = 300\text{ K}$, $T_{\text{vib}} = T_{\text{rot}} = 1000\text{ K}$ におけるArF*エキシマレーザ波長域に対する本計算結果をLeeらの結果^[F6]と比較して示す。計算結果ではスペクトル強度を実線の長さで表示し、スペクトル固有の線幅を無視して描いてある。 $T_{\text{vib}} = T_{\text{rot}} = 300\text{ K}$ の場合には、本計算結果は、Leeらの結果と良い一致を示す。

$T_{\text{vib}} = T_{\text{rot}} = 1000\text{ K}$ の場合、本報の計算結果とLeeらの結果はほぼ同一であるが、細かな点で多少の差異がみられる。たとえば(11,2)バンドは本報の計算では明瞭に現われているが、Leeらの結果では明確ではない。これは、本計算ではシューマン・ルンゲ・バンドの三重項を考慮しているのに対し、Leeらの計算ではそれが考慮されていないためであるものと推定される。

表2.9 ArF*エキシマレーザ波長域における主要バンド

Band (v'', v')	Branch
(4,0)	P(11)—P(21) R(15)—R(23)
(7,1)	P(17)—P(25) R(19)—R(27)
(10,2)	P(11)—P(21) R(13)—R(21)
(11,2)	P(25)—P(29) R(25)—R(29)
(14,3)	P(1)—P(11) R(1)—R(13)
(15,3)	P(9)—P(17) R(11)—R(19)
(16,3)	P(15)—P(21) R(17)—R(23)
(17,3)	P(19)—P(23) R(19)—R(23)
(18,3)	P(21)—P(25) R(23)—R(25)
(19,3)	P(23)—P(27) R(23)—R(27)
(20,3)	P(25)—P(27) R(25)—R(27)

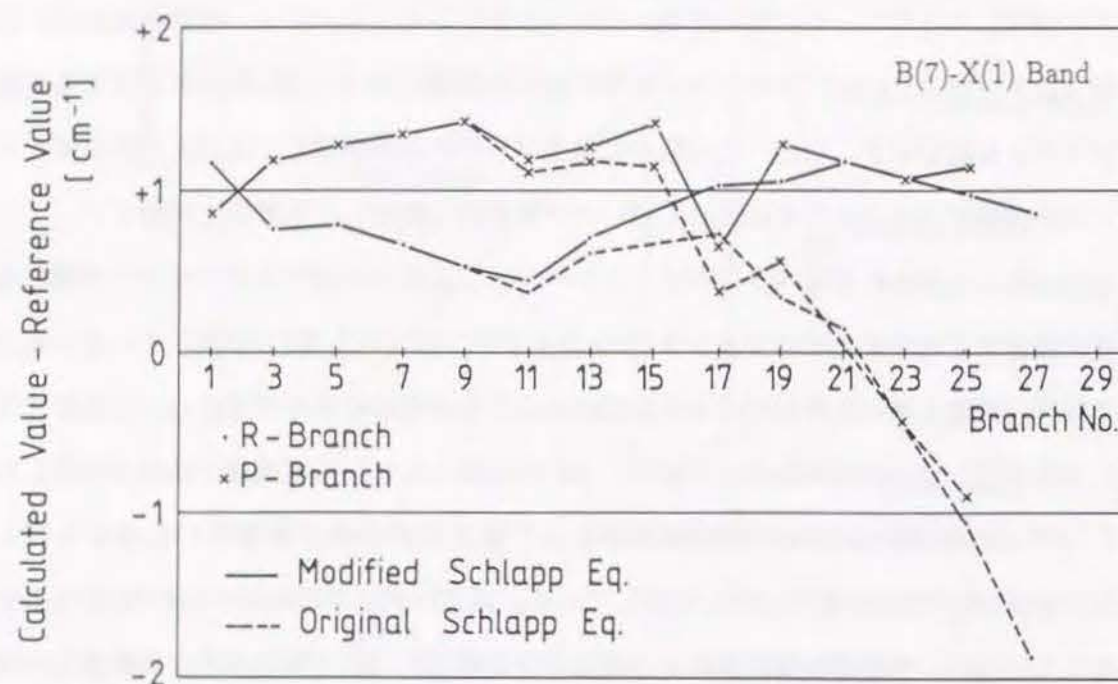


図2.14 シミュレーション値と実験値 [E7, E8] との比較

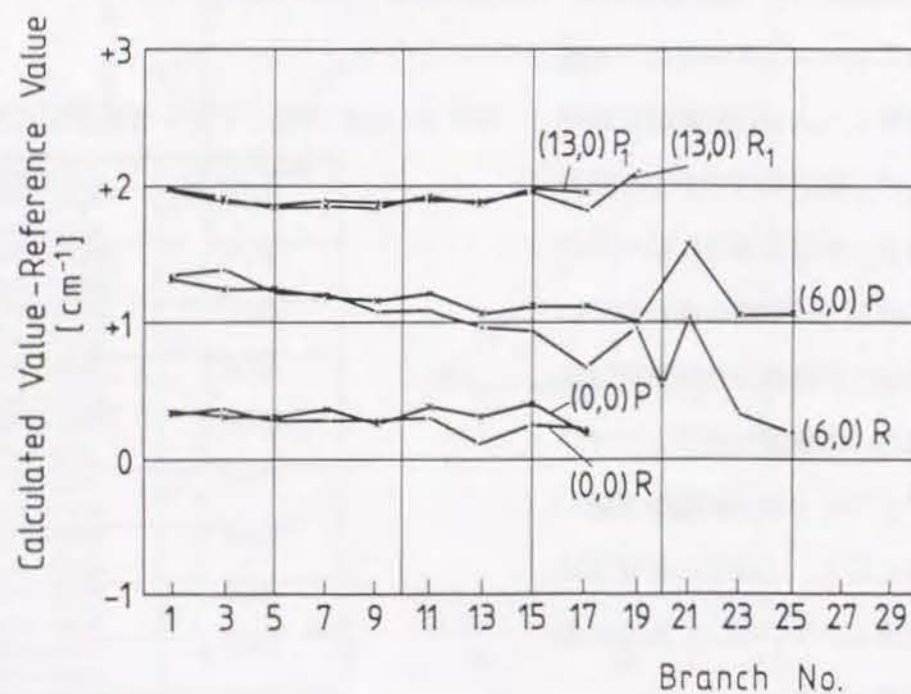
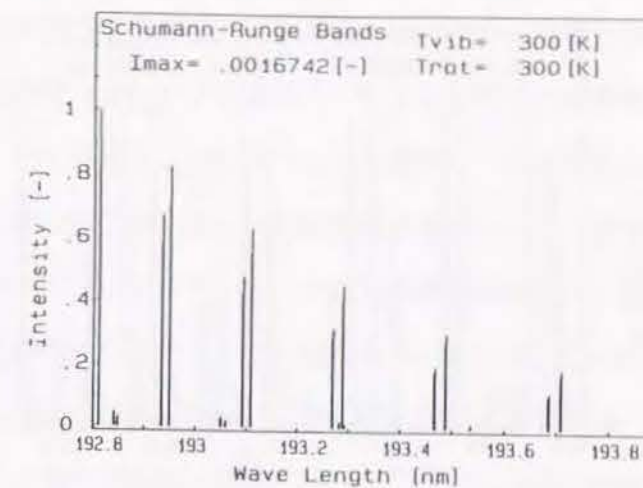


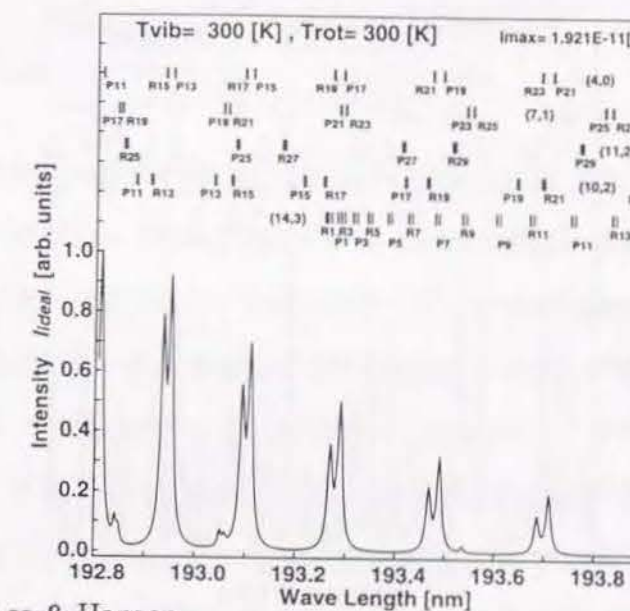
図2.15 シミュレーション値と実験値 [E7, E8] との比較

(a) Present Result

(a-1) スペクトル線幅を考慮しない場合



(a-2) スペクトル線幅を考慮した場合



(b) Result by Lee & Hanson

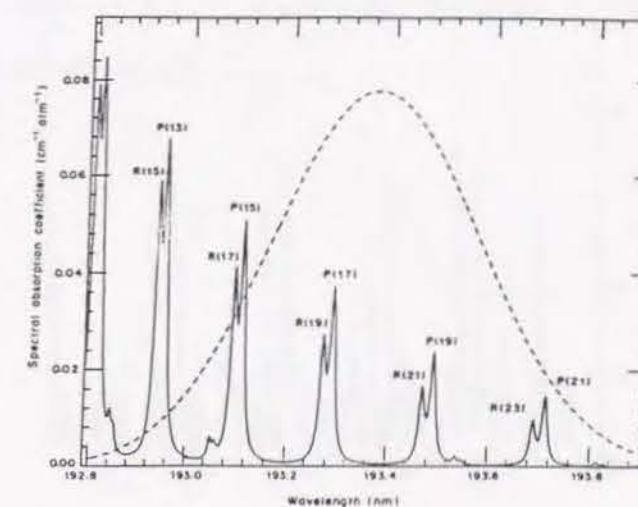
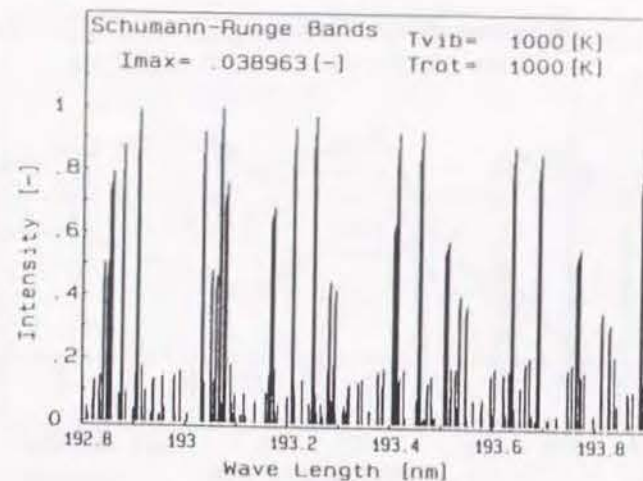


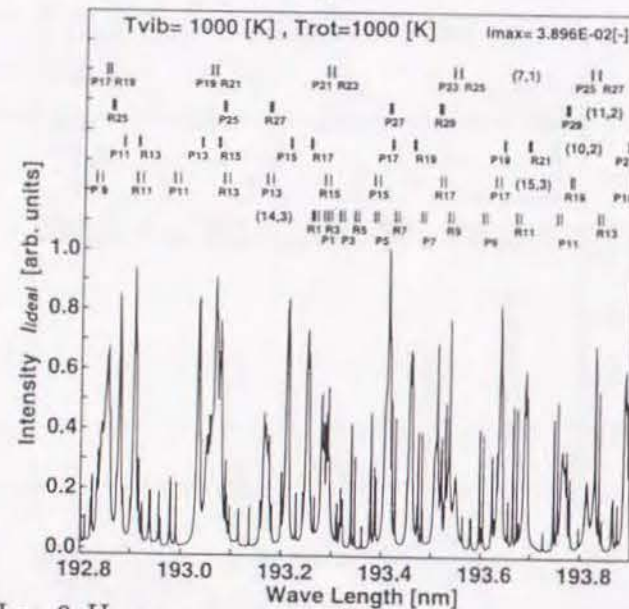
図2.16 本論文のシミュレーションスペクトルとLeeら [F6] の結果との比較
($T_{vib} = T_{rot} = 300K$ の場合)

(a) Present Result

(a-1) スペクトル線幅を考慮しない場合



(a-2) スペクトル線幅を考慮した場合



(b) Result by Lee & Hanson

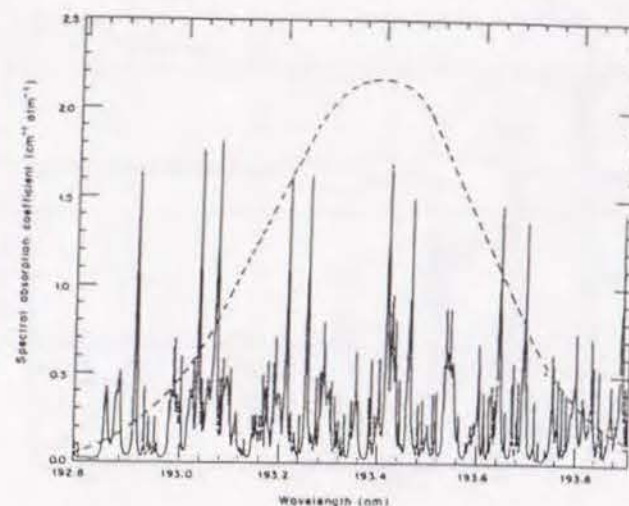


図2.17 本論文のシミュレーションスペクトルとLeeら[F6]の結果との比較
($T_{vib} = T_{rot} = 1000K$ の場合)

2.3.2 振動・回転温度平衡の場合におけるシューマン・ルンゲ・バンドの全体的特徴

図2.18に波長域175~200nmにおける温度平衡状態（本論文では並進，回転，振動運動にエネルギー等分配が成立する状態）にある O_2 のスペクトル強度分布の計算値を示す。図中の実線の山は上位準位 ($B^3\Sigma_u^-$) 下位準位 ($X^3\Sigma_g^-$) に対応する振動量子数 v', v'' が共通であるバンド (v', v'') 内に存在する回転スペクトル線のピーク点の包絡線を示している。個々のバンド (v', v'') には図2.3に示した回転遷移の主ブランチ，サテライトブランチがそれぞれ数百個以上含まれているので，ここでは包絡線で図示した。図2.18の縦軸は最大蛍光強度 $I_{J'J''max}^{v'v''}$ を基準に無次元化した蛍光強度を示している。この無次元化を行う際に用いた値を図中に I_{max} として示した。 O_2 が300Kの場合(図2.18(a))では，下位準位 ($X^3\Sigma_g^-$) の振動量子数が $v'' = 0$ の場合のみ蛍光強度が強い。これは O_2 分子の振動準位占有率に関する。

図2.19及び表2.10にボルツマン分布を仮定した場合の O_2 分子の振動準位占有率

$$N_{vib}(v'', T_{vib}) = \frac{\exp\{-G''(v'')/kT_{vib}\}}{\sum_{v''=0} \exp\{-G''(v'')/kT_{vib}\}} \quad (2.17)$$

を示す。温度が約500K以下の場合には O_2 分子のほとんどは $X^3\Sigma_g^-$ の $v'' = 0$ を占有しているために， $(v', 0)$ グループのみが現れ， $v'' = 0$ 以外の準位から遷移する O_2 分子の蛍光強度への寄与割合はきわめて小さい。気体の温度1000Kの場合(図2.18(b))には図2.19に示すように振動量子数 v'' が高い振動準位の占有率が増加するので， $v'' \geq 1$ の振動量子数からの遷移バンドグループ（例えば $(v', 1)$ ， $(v', 2)$...）も現われる。また図2.19において1000Kの場合において， $v'' = 1$ の占有率が $v'' = 0$ に比べて約1/10程度にもかかわらず，図2.18(b)でバンドグループ $(v', 1)$ が $(v', 0)$ と同等の蛍光強度を示す理由は，式(2.5)に含まれるフランク・コンドン因子の影響が働くためである。さらに高温になると，高い振動準位の占有率の増加，及び，フランク・コンドン因子値の増加により強度の強いバンドグループはさらに長波長側へ移動していく。

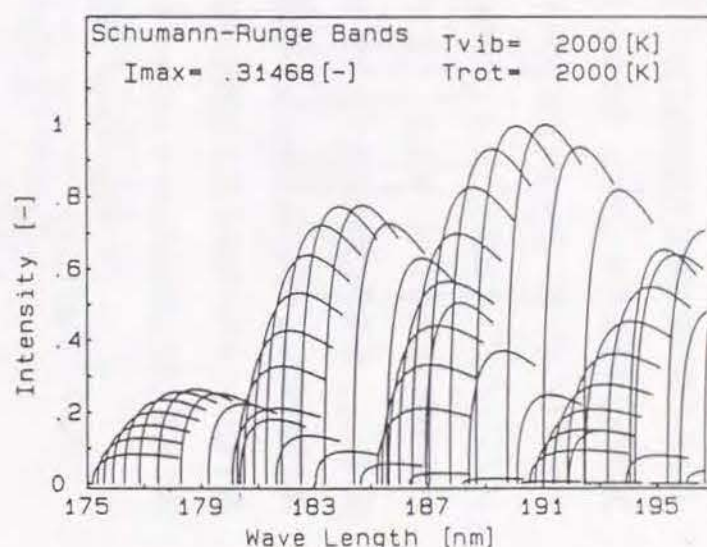
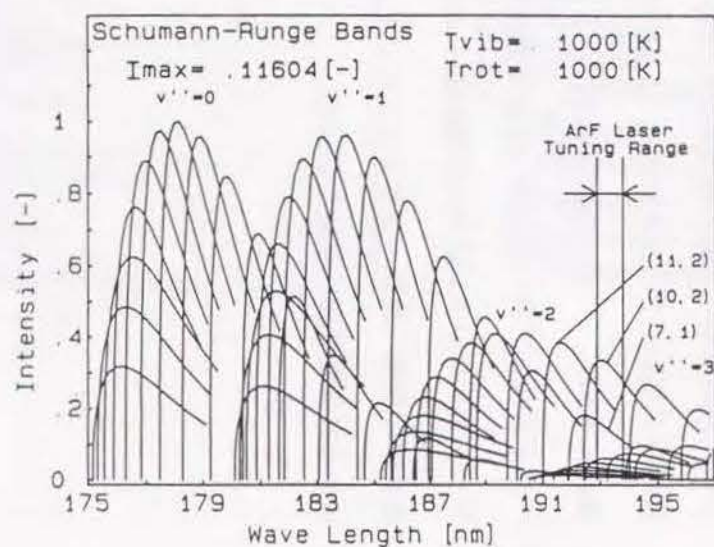
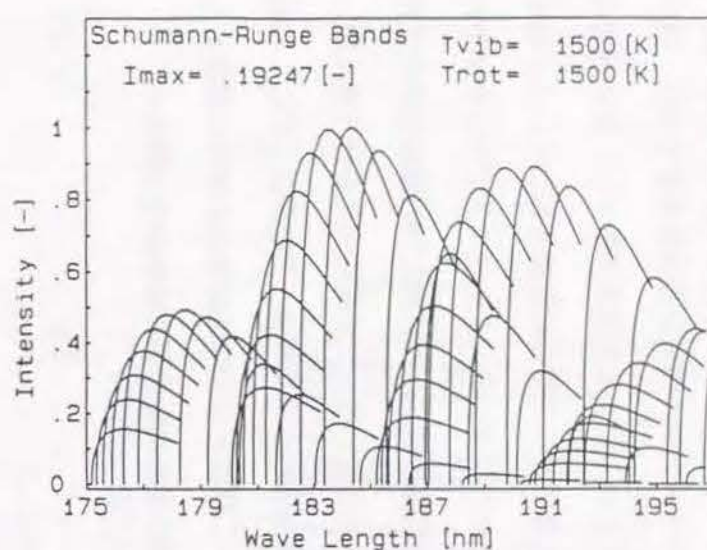
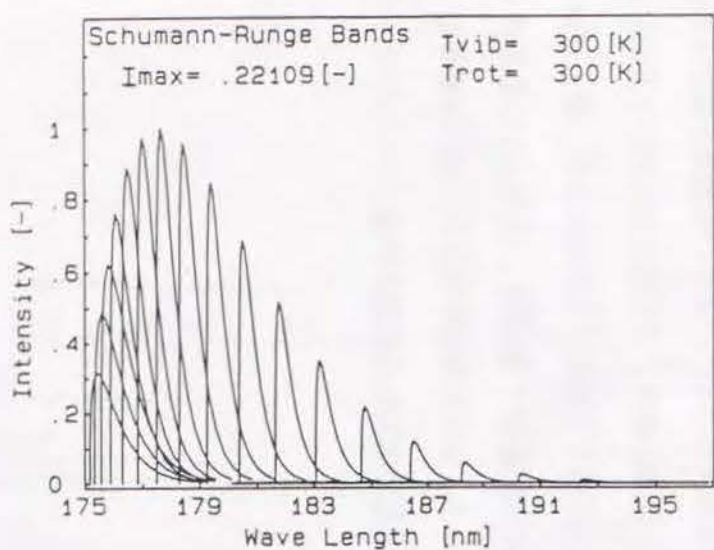


図2.18 シミュレーション結果 ($T_{vib} = T_{rot} = 300\text{K} \sim 2000\text{K}$)

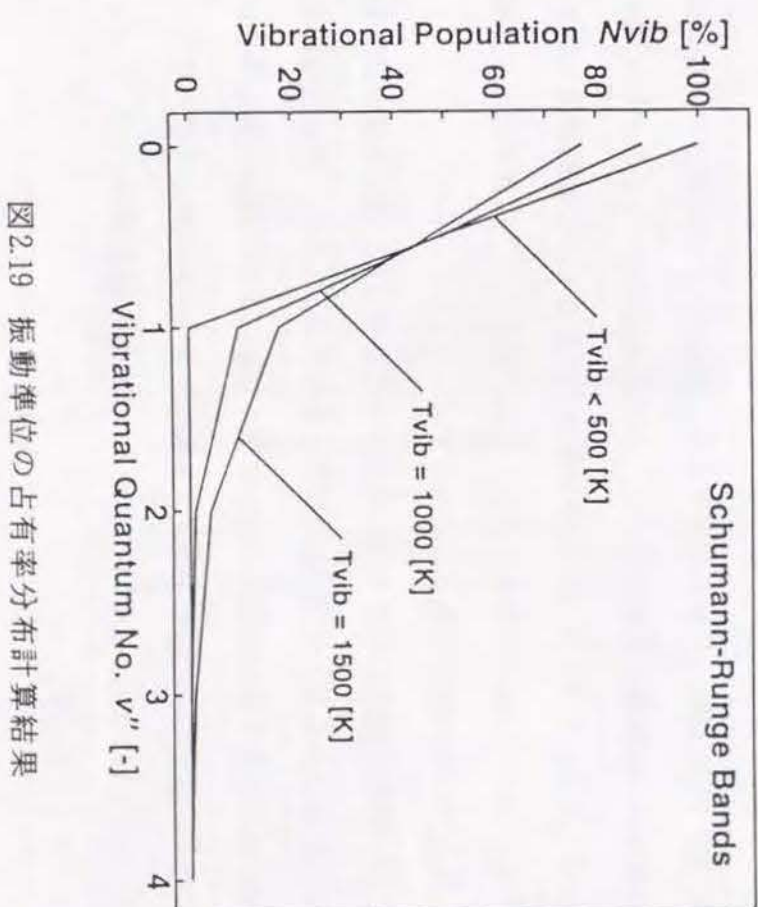


図2.19 振動準位の占有率分布計算結果

$T_{vib}[\text{K}]$	$v''=0$	$v''=1$	$v''=2$	$v''=3$	$v''=4$
100	100.00	—	—	—	—
300	99.96	0.04	—	—	—
500	98.88	1.12	—	—	—
1000	89.31	9.51	1.05	0.12	0.01
1500	77.40	17.40	4.00	0.94	0.02
2000	67.20	21.90	7.28	2.46	0.84

表2.10 $X^3\Sigma_g^-$ の振動準位占有率分布計算結果

2.3.3 振動・回転温度非平衡の場合におけるシューマン・ルンゲ・バンドの全体的特徴

分子の振動運動と回転運動とでは、緩和に必要な衝突回数は大きく異なり、回転緩和が起こり易い。したがって、希薄な流れ場では、振動温度と回転温度が必ずしも平衡しないことが予想される。例えば真空中に噴出する自由噴流中では $T_{tr} \sim T_{rot} \ll T_{vib}$ なる状態になり易いことが知られている。そこで本節ではスペクトル強度分布に対する温度非平衡の効果を検討する。

先に示した振動-回転温度平衡状態にある1000Kのスペクトル強度解析結果(図2.18(b))に対して、回転温度のみを500K, 100K, 50Kとした温度非平衡の場合の解析結果を図2.20に示す。図中(a)には平衡の場合に対する結果も再掲した。かかる非平衡状態は、例えばよどみ点温度1000Kの気体が真空中で急激に断熱膨張した状態などにみられる。回転温度のみが低い場合には、(i)バンドグループ相互ならびに各バンド相互の相対的大きさは全く変化しないが、個々のバンド幅は狭くなる、(ii)スペクトル強度は全体的に高くなる、などの傾向がある。(iii)はボルツマン分布に準拠した回転準位占有率

$$N_{rot}(K'', T_{rot}) = \sum_{i=1}^3 \frac{\text{const.} \cdot (2J''_i + 1) \cdot \exp\{-F''_i(J''_i)/kT_{rot}\}}{\sum (2J'' + 1) \cdot \exp\{-F''(J'')/kT_{rot}\}} \quad (2.18)$$

$$\sum_{K''=0} N_{rot}(K'', T_{rot}) = 1.0 \quad (2.19)$$

の計算結果(図2.21及び表2.11)から説明できる。すなわち、回転準位の占有率は回転温度が低い場合程小さい回転量子数側に移行し、かつ極大値も高くなるので、スペクトル強度が相対的に強くなる。なお、式(2.18)中分母の Σ はある1つの振動準位に含まれるすべての回転準位についての総和であり、また、 $\sum_{i=1}^3$ は回転準位 K'' に含まれる3重項の回転準位 F_1, F_2, F_3 についての総和であることを示す。

表2.11に同一振動準位内における回転準位の占有率を示す。回転温度が2000Kの場合には、分子は回転準位 $0 \leq K'' \leq 73$ の範囲に広く分布する。しかし、回転温度が低下するにつれて占有する回転量子数の範囲はしだいに狭くなり、かつ、低位の回転準位に集中してくる傾向がある。この点で、回転スペクトル線のブランチの同定は容易になってくる。特に回転温度が100K以下では、ArF*エキシマレーザの掃引波長域内で(14, 3)バンドのみが孤立するスペクトルを示す。

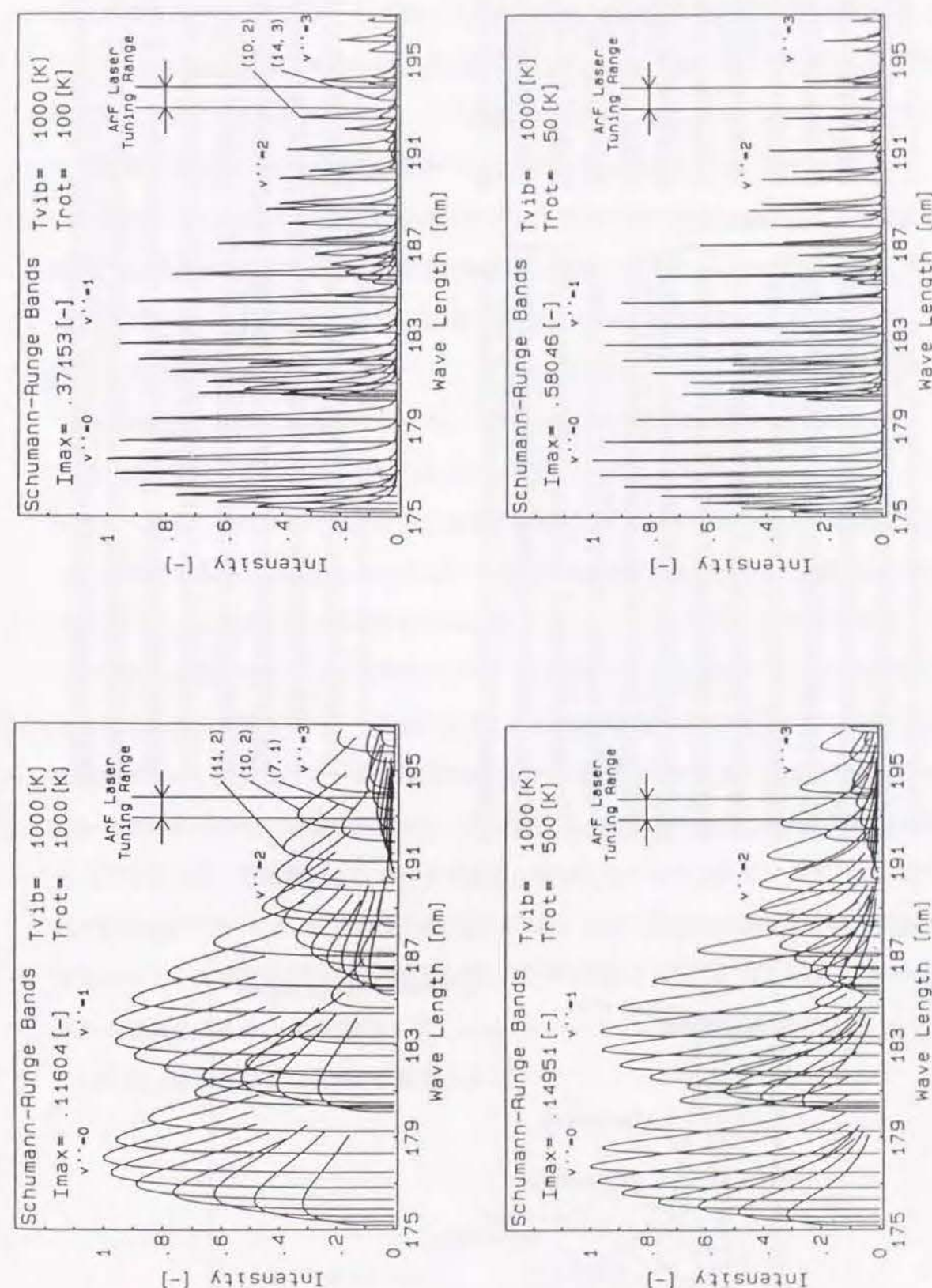


図2.20 温度非平衡の場合のシュレーション結果 ($T_{vib} = 1000\text{K}$, $T_{rot} = 50 \sim 1000\text{K}$)

表2.11 回転準位の占有率分布計算結果

Rotational State Relative Population [%]									Rotational State Relative Population [%]										
Trot=10K				Trot=100K				Trot=1000K				Trot=10000K				Trot=20000K			
K	F1	F2	F3 Total	K	F1	F2	F3 Total	K	F1	F2	F3 Total	K	F1	F2	F3 Total				
0	0.16	328	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0	0.137	0.000	0.000	0	0.137	0.000	0.000				
1	123.577	110.796	7.436	123.577	110.796	7.436	123.577	1	0.137	0.000	0.000	1	0.137	0.000	0.000				
2	2.159	7.866	4.536	2.159	7.866	4.536	2.159	2	0.137	0.000	0.000	2	0.137	0.000	0.000				
3	5.418	3.183	3.068	5.418	3.183	3.068	5.418	3	0.137	0.000	0.000	3	0.137	0.000	0.000				
4	1.269	782	816	1.269	782	816	1.269	4	0.137	0.000	0.000	4	0.137	0.000	0.000				
5	190	121	132	190	121	132	190	5	0.137	0.000	0.000	5	0.137	0.000	0.000				
6	0.018	0.012	0.013	0.018	0.012	0.013	0.018	6	0.137	0.000	0.000	6	0.137	0.000	0.000				
7	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	7	0.137	0.000	0.000	7	0.137	0.000	0.000				
8	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	8	0.137	0.000	0.000	8	0.137	0.000	0.000				
9	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	9	0.137	0.000	0.000	9	0.137	0.000	0.000				
10	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	10	0.137	0.000	0.000	10	0.137	0.000	0.000				
11	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	11	0.137	0.000	0.000	11	0.137	0.000	0.000				
12	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	12	0.137	0.000	0.000	12	0.137	0.000	0.000				
13	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	13	0.137	0.000	0.000	13	0.137	0.000	0.000				
14	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	14	0.137	0.000	0.000	14	0.137	0.000	0.000				
15	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	15	0.137	0.000	0.000	15	0.137	0.000	0.000				
16	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	16	0.137	0.000	0.000	16	0.137	0.000	0.000				
17	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	17	0.137	0.000	0.000	17	0.137	0.000	0.000				
18	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	18	0.137	0.000	0.000	18	0.137	0.000	0.000				
Rotational State Relative Population [%]									Rotational State Relative Population [%]										
Trot=300K				Trot=500K				Trot=1000K				Trot=2000K							
K	F1	F2	F3 Total	K	F1	F2	F3 Total	K	F1	F2	F3 Total	K	F1	F2	F3 Total				
0	0.683	0.000	0.000	0.683	0.411	0.000	0.000	0	0.683	0.000	0.000	0	0.683	0.000	0.000				
1	1.133	0.672	2.228	1.133	0.683	0.408	1.137	1	1.133	0.672	2.228	1	1.133	0.672	2.228				
2	1.543	1.092	2.662	1.543	1.092	2.662	1.543	2	1.543	1.092	2.662	2	1.543	1.092	2.662				
3	1.904	1.467	3.059	1.904	1.467	3.059	1.904	3	1.904	1.467	3.059	3	1.904	1.467	3.059				
4	2.219	1.785	3.402	2.219	1.785	3.402	2.219	4	2.219	1.785	3.402	4	2.219	1.785	3.402				
5	2.430	2.037	3.682	2.430	2.037	3.682	2.430	5	2.430	2.037	3.682	5	2.430	2.037	3.682				
6	2.581	2.216	3.893	2.581	2.216	3.893	2.581	6	2.581	2.216	3.893	6	2.581	2.216	3.893				
7	2.656	2.321	4.031	2.656	2.321	4.031	2.656	7	2.656	2.321	4.031	7	2.656	2.321	4.031				
8	2.659	2.356	4.098	2.659	2.356	4.098	2.659	8	2.659	2.356	4.098	8	2.659	2.356	4.098				
9	2.596	2.326	4.011	2.596	2.326	4.011	2.596	9	2.596	2.326	4.011	9	2.596	2.326	4.011				
10	2.417	2.240	3.845	2.417	2.240	3.845	2.417	10	2.417	2.240	3.845	10	2.417	2.240	3.845				
11	2.315	2.108	3.643	2.315	2.108	3.643	2.315	11	2.315	2.108	3.643	11	2.315	2.108	3.643				
12	2.199	1.942	3.403	2.199	1.942	3.403	2.199	12	2.199	1.942	3.403	12	2.199	1.942	3.403				
13	1.902	1.753	3.138	1.902	1.753	3.138	1.902	13	1.902	1.753	3.138	13	1.902	1.753	3.138				
14	1.676	1.553	2.859	1.676	1.553	2.859	1.676	14	1.676	1.553	2.859	14	1.676	1.553	2.859				
15	1.453	1.351	2.759	1.453	1.351	2.759	1.453	15	1.453	1.351	2.759	15	1.453	1.351	2.759				
16	1.236	1.151	2.593	1.236	1.151	2.593	1.236	16	1.236	1.151	2.593	16	1.236	1.151	2.593				
17	1.033	0.968	2.021	1.033	0.968	2.021	1.033	17	1.033	0.968	2.021	17	1.033	0.968	2.021				
18	0.859	0.798	1.762	0.859	0.798	1.762	0.859	18	0.859	0.798	1.762	18	0.859	0.798	1.762				
19	0.689	0.621	1.495	0.689	0.621	1.495	0.689	19	0.689	0.621	1.495	19	0.689	0.621	1.495				
20	0.548	0.517	1.363	0.548	0.517	1.363	0.548	20	0.548	0.517	1.363	20	0.548	0.517	1.363				
21	0.438	0.407	1.229	0.438	0.407	1.229	0.438	21	0.438	0.407	1.229	21	0.438	0.407	1.229				
22	0.332	0.314	1.003	0.332	0.314	1.003	0.332	22	0.332	0.314	1.003	22	0.332	0.314	1.003				
23	0.252	0.240	0.724	0.252	0.240	0.724	0.252	23	0.252	0.240	0.724	23	0.252	0.240	0.724				
24	0.189	0.179	0.542	0.189	0.179	0.542	0.189	24	0.189	0.179	0.542	24	0.189	0.179	0.542				
25	0.139	0.133	0.429	0.139	0.133	0.429	0.139	25	0.139	0.133	0.429	25	0.139	0.133	0.429				
26	0.101	0.096	0.393	0.101	0.096	0.393	0.101	26	0.101	0.096	0.393	26	0.101	0.096	0.393				
27	0.073	0.067	0.299	0.073	0.067	0.299	0.073	27	0.073	0.067	0.299	27	0.073	0.067	0.299				
28	0.051	0.049	0.247	0.051	0.049	0.247	0.051	28	0.051	0.049	0.247	28	0.051	0.049	0.247				
29	0.035	0.034	0.233	0.035	0.034	0.233	0.035	29	0.035	0.034	0.233	29	0.035	0.034	0.233				
30	0.024	0.023	0.213	0.024	0.023	0.213	0.024	30	0.024	0.023	0.213	30	0.024	0.023	0.213				
31	0.016	0.016	0.155	0.016	0.016	0.155	0.016	31	0.016	0.016	0.155	31	0.016	0.016	0.155				
32	0.011	0.010	0.133	0.011	0.010	0.133	0.011	32	0.011	0.010	0.133	32	0.011	0.010	0.133				
33	0.007	0.007	0.121	0.007	0.007	0.121	0.007	33	0.007	0.007	0.121	33	0.007	0.007	0.121				
34	0.005	0.004	0.113	0.005	0.004	0.113	0.005	34	0.005	0.004	0.113	34	0.005	0.004	0.113				
35	0.003	0.003	0.095	0.003	0.003	0.095	0.003	35	0.003	0.003	0.095	35	0.003	0.003	0.095				
36	0.002	0.002	0.085	0.002	0.002	0.085	0.002	36	0.002	0.002	0.085	36	0.002	0.002	0.085				
37	0.001	0.001	0.073	0.001	0.001	0.073	0.001	37	0.001	0.001	0.073	37	0.001	0.001	0.073				
38	0.001	0.001	0.062	0.001	0.001	0.062	0.001	38	0.001	0.001	0.062	38	0.001	0.001	0.062				
39	0.001	0.001	0.051	0.001	0.001	0.051	0.001	39	0.001	0.001	0.051	39	0.001	0.001	0.051				
40	0.000	0.000	0.040	0.000	0.000	0.040	0.000	40	0.000	0.000	0.040	40	0.000	0.000	0.040				
41	0.000	0.000	0.030	0.000	0.000	0.030	0.000	41	0.000	0.000	0.030	41	0.000	0.000	0.030				
42	0.000	0.000	0.020	0.000	0.000	0.020	0.000	42	0.000	0.000	0.020	42	0.000	0.000	0.020				
43	0.000	0.000	0.010	0.000	0.000	0.010	0.000	43	0.000	0.000	0.010	43	0.000	0.000	0.010				
44	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	44	0.000	0.000	0.000	44	0.000	0.000	0.000				
45	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	45	0.000	0.000	0.000	45	0.000	0.000	0.000				
46	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	46	0.000	0.000	0.000	46	0.000	0.000	0.000				
47	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	47	0.000	0.000	0.000	47	0.000	0.000	0.000				
48	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	48	0.000	0.000	0.000	48	0.000	0.000	0.000				
49	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	49	0.000	0.000	0.000	49	0.000	0.000	0.000				
50	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	50	0.000	0.000	0.000	50	0.000	0.000	0.000				
51	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	51	0.000	0.000	0.000	51	0.000	0.000	0.000				
52	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	52	0.000	0.000	0.000	52	0.000	0.000	0.000				
53	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	53	0.000	0.000	0.000	53	0.000	0.000	0.000				

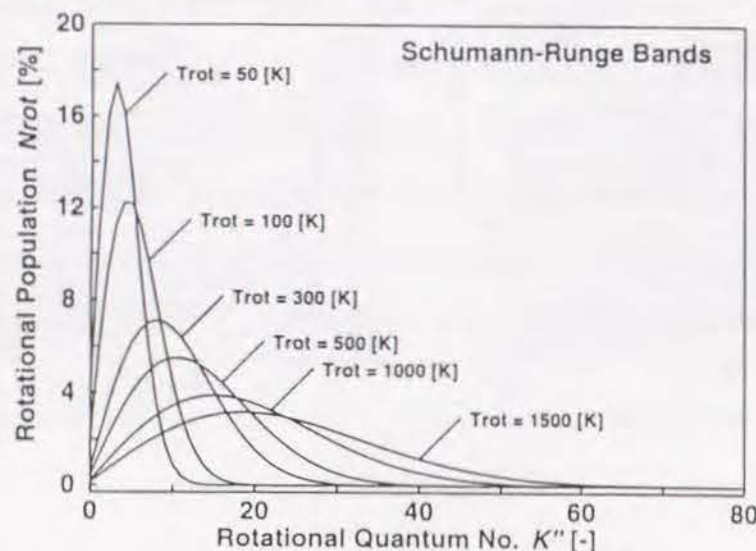


図2.21 回転準位の占有率分布計算結果

2.3.4 温度測定を行うための O_2 -LIPF用レーザ波長

シューマン・ルンゲ・バンドを対象とする O_2 -LIPFに適したレーザ波長について検討する。限定されている商用レーザ波長の中では、紫外の最短波長域に位置するArF*エキシマレーザ(193.4nm)が第1候補とならざるを得ないが、シューマン・ルンゲ・バンドの性質から見ると必ずしもArF*エキシマレーザが最良ではない。2.3.2節、及び、2.3.3節に示した計算結果に基づいて、温度測定を行うためのレーザ波長について考察する。

シューマン・ルンゲ・バンドの蛍光スペクトル強度分布は気体の温度によって変化するので、 O_2 -LIPFを適用する場合、測定対象のガス温度に応じてレーザ波長を決めることが理想的である。一般にLIFの波長域を選定する場合の必要条件として、

- 蛍光強度が強い。
- スペクトル線の重複が少く、バンド及びブランチの同定が容易である。
- 商用レーザとして入手可能な波長域である。

が考えられる。条件(iii)は時代とともに変化するので、とりあえず除いて考えると、すべての温度範囲で条件(i)(ii)項目を満足するレーザ波長域はまず第1に177~179nmなる波長域があげられる。この波長域では温度域によらずバンドグループ($v', 0$)しか存在せずスペクトルの同定が容易である上に、振動準位 $v''=0$ の占有率が常に大きいので、蛍光強度が強い。次に考えられる波長域は183~185nmである。特に低振動温度域では(9, 0)、また、高振動温度域では(14, 1)(13, 1)バンドなどが O_2 -LIPFの対象となりうる。現在、177~179nm、183~185nmには適切な商用レーザがないのでこれらの波長域を使った O_2 -LIPFの例は報告されていないが、将来検討されるべきである。現在、 O_2 -LIPFの励起レーザとして用いられているArF*エキシマレーザの波長域(192.9~193.8nm)を図2.18に示す。この波長域では、蛍光スペクトル強度は、前述の波長域候補に比べれば弱いものの、何とか O_2 -LIPFが適用出来る領域と云える。低振動温度域では(4, 0)バンドが、高振動温度域では(7, 1)(10, 2)(11, 2)(14, 3)バンドなどが支配的である。

2.3.5 温度領域別にみたArF*エキシマレーザ波長域の回転スペクトル

2.3.2 及び 2.3.3 節ではシューマン・ルンゲ・バンドの概略を知るために回転スペクトル線のピークの包絡線に注目して総括的に論じたが、本節ではArF*エキシマレーザを使用して O_2 -LIPFを行うことを前提にして個々の回転スペクトル線に着目して検討する。

2.3.5.1 振動・回転温度平衡の気体の場合

図2.22(a)~(f)に気体温度が1500K~50Kの範囲にある場合の、ArF*エキシマレーザ波長域の回転スペクトルを示した。図中では前期解離線幅のみを考慮した式(2.8)に基づく理想スペクトル形状を示している。また、縦軸は波長範囲192.8~193.9nmにおける最大強度 I_{max} で無次元化しており、回転スペクトル線のブランチ番号との対応が一目で確認できるように回転スペクトル線の位置にバーを表示した。表2.12には、各温度条件における蛍光スペクトル強度を対比する目安として無次元化に使用した最大強度を示す。

ここで、図2.22、及び、表2.12を参照しながら、温度別に回転スペクトルの特性を考察する。

(i) $T_{vib} = T_{rot} = 1500K$ の場合 (図2.22(a))

本章2.3.2節の図2.18で考察したように、温度が高い場合ほどスペクトル強度の強いバンドが長波長側へ移行するので、表2.12中ではArF*エキシマレーザ波長域のスペクトル強度は $T_{vib} = T_{rot} = 1500K$ の場合に最も強い。したがって、 O_2 -LIPFを用いた温度測定では、高温になるほど蛍光検出が行い易い。しかし、他方ではスペクトルは最も複雑であり、(7, 1)(10, 2)(11, 2)(14, 3)(15, 3)等のバンドがすべて重なり合っている。温度測定では、同一バンド内のスペクトル線強度分布から式(1.4)によって回転温度を算出するので、バンド内のブランチ番号を特定できない複雑なスペクトルは望ましくない。

このような複雑なスペクトル中で、最も識別しやすいバンドは(10, 2)であり、P13, P15, P17, P19, R15, R17, R19, R21などが温度測定時の対象ブランチとして利用できると思われる。

(ii) $T_{vib} = T_{rot} = 1000K$ の場合 (図2.22(b))

$T_{vib} = T_{rot} = 1500K$ の場合と同様に回転スペクトル線は重複かつ密集し、かなり複雑である。1500Kの場合と1000Kの場合では大差がない。1000K以上では温度変化に伴うスペクトルの変化が鈍く、この温度域では温度測定精度が悪い。

$T_{vib} = T_{rot} = 1500K$ の場合と同様に、注目すべきバンドは(10, 2)である。約193.17nm近傍の(11, 2)バンドのR27も孤立しているから、それを高温域温度測定の

対象回転スペクトル線とすることも考えられる。

(iii) $T_{vib} = T_{rot} = 500K$ の場合 (図2.22(c))

この温度レベルまで下がると、高位の振動準位の占有率が低下し、1500K, 1000Kの場合にみられた(14, 3)(15, 3)バンドは観測されなくなる。

回転温度測定に使用できるバンドは、(7, 1)(10, 2)(4, 0)である。高温域で強く見えた(10, 2)バンドは弱くなり、(7, 1)バンドのP19~P23, R21~R25のブランチが明確に観測される。(7, 1)バンドは図2.6に示したように、前期解離線幅が太いので、観測されるスペクトル線幅が太くなる。

(iv) $T_{vib} = T_{rot} = 300K$ の場合 (図2.22(d))

常温域の温度では、最低位の振動準位 $v'' = 0$ しか占有率を持たないので、強い2本ずつのペアのみが現れることとなる。これらは(4, 0)バンドのR15~R23, P13~P21ブランチであり、エキシマレーザ光を大気中で用いると吸収線として現れるので、 O_2 -LIPF実験における波長校正の基準点として有用である。図2.3で説明したようにシューマン・ルンゲ・バンドは3重項の構造を持つから、例えばR19は本来R₁19, R₂19, R₃19の3つに分離しているが、これら3本の中心波長のずれ約 0.5 cm^{-1} に比べて前期解離線幅が約 3 cm^{-1} (図2.6)と6倍程度大きい^[E11] ために通常分離して観測されることはない。

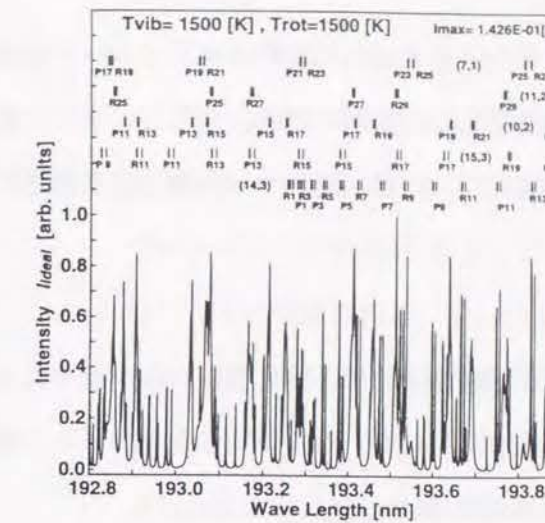
表2.12を見ると、この温度域付近からスペクトル強度が急激に低下する。図2.18で考察したように、低温域になるにつれて、スペクトル強度の強いバンドが短波長側へと移行するので、ArF*エキシマレーザ波長で励起可能な O_2 分子数が十分でなくなり、光検出限界を下まわって実験不能となる可能性が出てくる。

(v) $T_{vib} = T_{rot} \leq 100K$ の場合 (図2.22(e)(f))

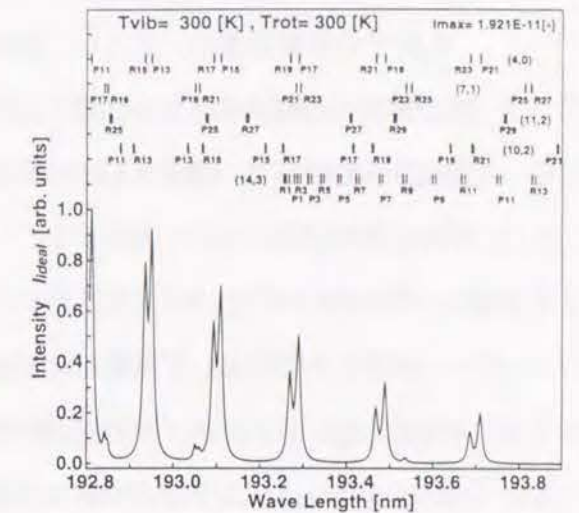
この温度域のスペクトルは300Kの場合と同様に(4, 0)バンドしか現れない。その上、温度が低下するにつれて高位の回転準位の占有率が低下するので、300Kでは観測できた回転スペクトル線も見えなくなる。このため100K以下の温度平衡の気体は、ArF*エキシマレーザを用いた O_2 -LIPFでは温度測定が非常に困難であり、さらに短波長のレーザの開発が切望される。

表2.12 スペクトル強度の無次元化に用いた最大強度 I_{max} の計算結果

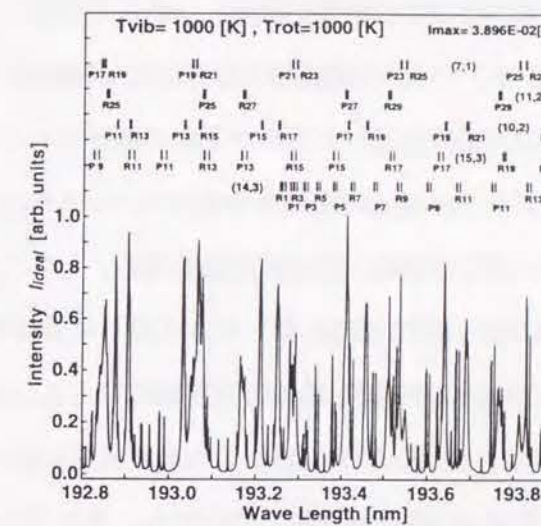
$T_{rot}[\text{K}] \backslash T_{vib}[\text{K}]$		10	50	100	300	500	1000	1500	[arb. units]
$T_{rot}[\text{K}]$	$T_{vib}[\text{K}]$								
10	10	1.86×10^{-13}							
50	50	1.86×10^{-13}	1.07×10^{-4}						
100	100	1.86×10^{-13}	1.07×10^{-4}	8.16×10^{-4}					
300	300	3.13×10^{-8}	1.07×10^{-4}	8.16×10^{-4}	1.67×10^{-3}				
500	500	2.10×10^{-4}	1.06×10^{-4}	8.07×10^{-4}	1.66×10^{-3}	2.19×10^{-3}			
1000	1000	1.42×10^{-1}	4.43×10^{-2}	2.81×10^{-2}	5.28×10^{-2}	4.71×10^{-2}	3.90×10^{-2}		
1500	1500	1.11×10^0	3.48×10^{-1}	2.20×10^{-1}	2.01×10^{-1}	1.79×10^{-1}	1.48×10^{-1}	1.43×10^{-1}	



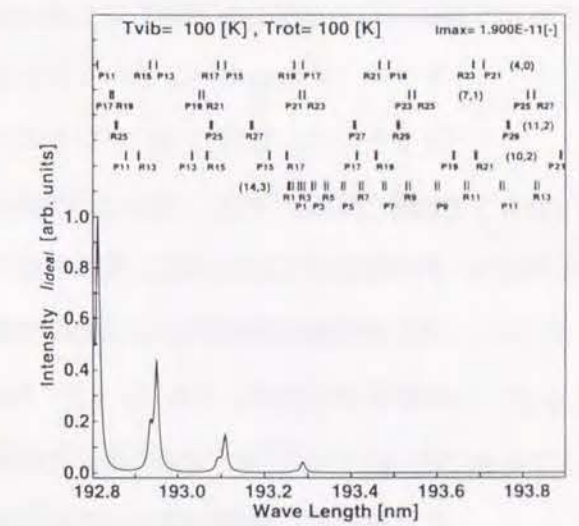
(a) $T_{vib} = T_{rot} = 1500K$



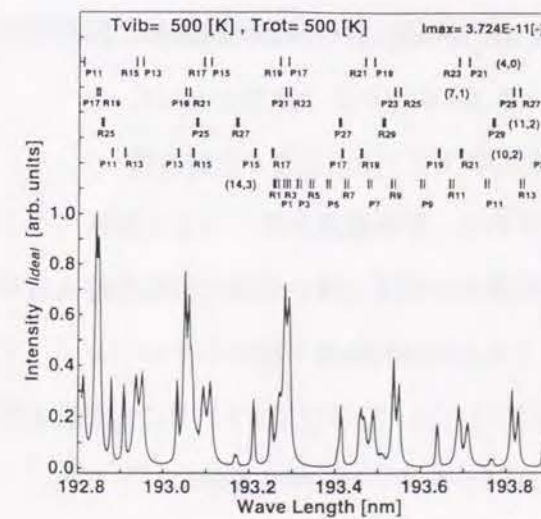
(d) $T_{vib} = T_{rot} = 300K$



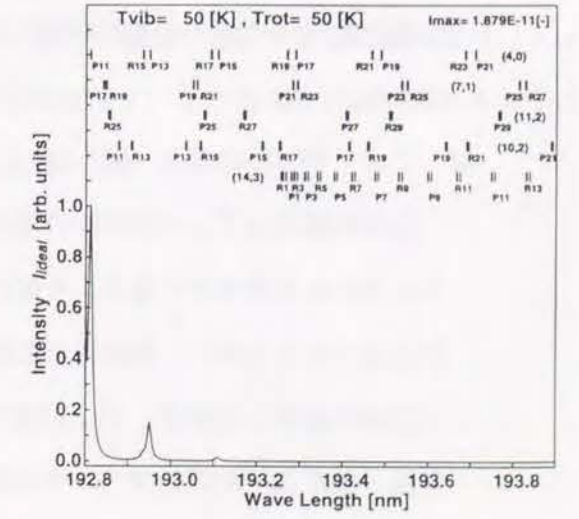
(b) $T_{vib} = T_{rot} = 1000K$



(e) $T_{vib} = T_{rot} = 100K$



(c) $T_{vib} = T_{rot} = 500K$



(f) $T_{vib} = T_{rot} = 50K$

図2.22 ArF* エキシマレーザ波長域の回転スペクトルシミュレーション結果 (温度平衡気体の場合)

2.3.5.2 振動・回転温度非平衡の気体の場合

O_2 分子の振動温度を一定とし、回転温度を変化させた場合のArF*エキシマレーザ波長域における回転スペクトルに関する計算結果を図2.23～2.27に示す。表2.12に示した最大強度を参照して、温度非平衡の場合に対するスペクトルパターンの特徴と温度測定の可能性との関係について考察する。

(i) $T_{vib} = 1500K$ の場合 (図2.23)

本章3.3節において考察したように、振動温度が一定で、回転温度のみが低くなる場合、バンドグループ間の相対的大きさは変化しないが、 (v', v'') の個々のバンド幅が狭くなり、バンドごとの重なり合いの程度が減る。

$T_{vib} = 1500K$ の場合にも、この基本現象が認められる。図2.23(a)の温度平衡状態から、 T_{rot} のみが低下していくと、高位の回転ブランチの強度が低下し、低位の回転ブランチ（すなわちバンドヘッドに近いブランチ）の相対的強度が強くなる。具体的に云うと、(7, 1)(11, 2)バンドの20番以上の高位の回転ブランチが T_{rot} の低下につれて弱くなる。一方、(14, 3)バンドはArF*エキシマレーザ波長域の中央にバンドヘッドが存在しているので、 T_{rot} の低下とともに低位の回転ブランチが強くなる。(14, 3)バンドの優位性は $T_{rot} \leq 500K$ で現われ、100K以下では(14, 3)バンドのみに着目すれば十分である。(14, 3)バンドの存在しない193.0～193.25nmの波長域に見える(10, 2)バンドのR15ブランチは孤立しているので、 $100K \leq T_{rot} < 500K$ の温度範囲においては補助的な参照対象として利用できる。蛍光スペクトル強度についても、表2.12から、バンドヘッドに占有率が集中する(14, 3)バンドが存在するために、 T_{rot} が低くなると蛍光スペクトル強度も強くなり、 O_2 -LIPF実験における蛍光検出は比較的容易である。

(ii) $T_{vib} = 1000K$ の場合 (図2.24)

全体的傾向は $T_{vib} = 1500K$ の場合と同様であり、回転温度が低くなると回転スペクトルはかなり見やすくなる。すなわち、回転温度の低下に伴い低位の回転準位占有率が大きくなるために、観測される回転スペクトル線は回転量子数の小さいバンドヘッド近傍に集中して来る。 T_{rot} が低下すると(7, 1)(10, 2)(11, 2)バンドに含まれる回転量子数が高位の回転ブランチは消失し、ArF*エキシマレーザ波長域にバンドヘッドを持つ(14, 3)バンドのみが強く観測される。バンドヘッド近傍では3重項間の遷移エネルギー差も大きく、かつ、(14, 3)バンドの前期解離線幅は 0.2 cm^{-1} と小さいので、3重項の内 F_2 と F_3 が重複して1本、 F_1 が単独で1本としてあたかも2重項の如く観

測される。

(iii) $T_{vib} = 500K$ の場合 (図2.25)

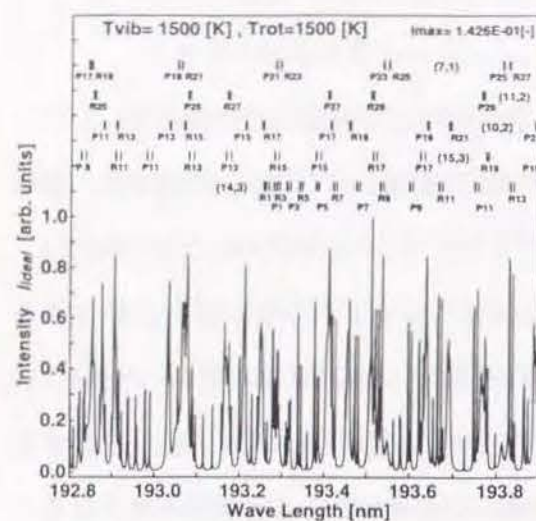
$T_{vib} = 500K$ の場合においては、1500K、1000Kなどの高温域とは異なり、ArF*エキシマレーザ波長域において観測されるバンドは、種類が多くない。その結果、着目すべきバンドが約300K以上では(7, 1)バンドと(10, 2)バンド、100K以下では(14, 3)バンドに限定される。 T_{rot} が低くなるにつれて、バンドヘッドが中央に存在する(14, 3)バンドのみが支配的となる。回転温度が低下し、ArF*エキシマレーザ内に(14, 3)バンドが単一で存在するようになると、図2.23(f)、図2.24(e)、図2.25(d)を比較するとわかるように振動温度の違いによるスペクトルの差異はほとんど検出不能となる。したがって、 T_{rot} の低い場合の振動温度の相違を問題とすべき状況下では、ArF*エキシマレーザとそれ以外の波長のレーザを併用して、異なった遷移バンドの強度を測定する必要が生じる。

(iv) $T_{vib} = 300K$ の場合 (図2.26)

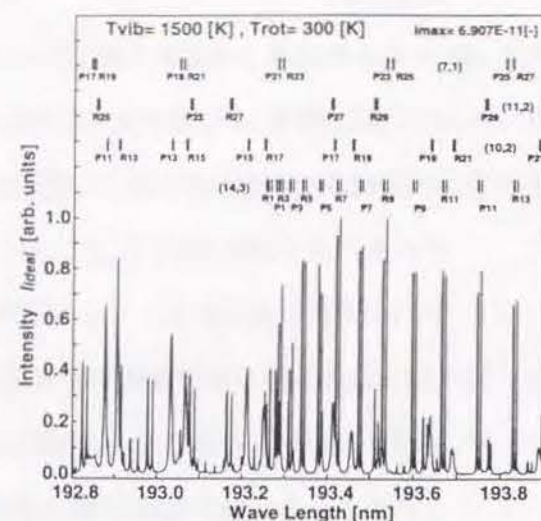
$T_{vib} = 300K$ の場合には、 T_{rot} がいかに変化しても(4, 0)バンドしか観測できない。図2.26(d)の場合のように、 T_{rot} が極めて低い場合には、(14, 3)バンドが支配的ではあるが、最大強度は表2.12に見られるように $T_{vib} = 1000K$ の場合の $1/10 \sim 1/10^7$ と小さく、蛍光の検出が相当困難となるので、(14, 3)バンドの存在も意味がなくなる。 T_{vib} が常温以下では、振動準位の占有率は $v'' = 0$ に限られ、 $v'' = 3$ からの遷移によって生ずる(14, 3)は事実上ないのに等しくなるからである。

(v) $T_{vib} \leq 100K$ の場合 (図2.27)

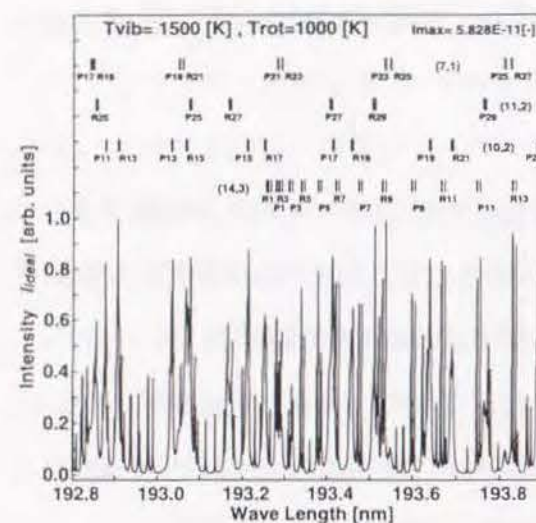
振動温度がさらに低い場合には、 $T_{vib} = 300K$ の場合の特性がさらに強くなり、 T_{rot} がいかに変化しようとも(4, 0)バンドしか存在せず、しかも表2.12に見られるように蛍光強度も弱く、 O_2 -LIPF実験は困難となる。



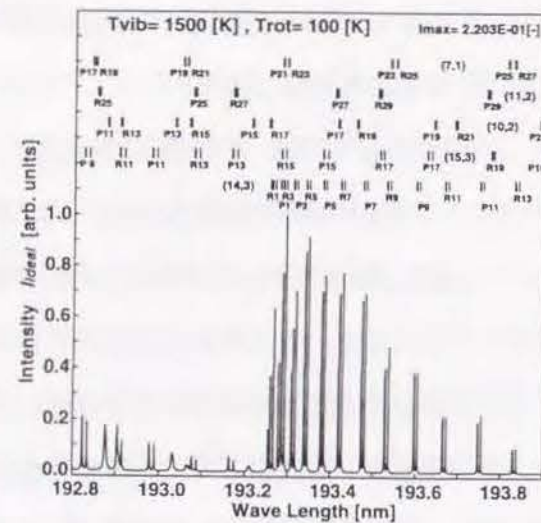
(a) $T_{rot} = 1500K$



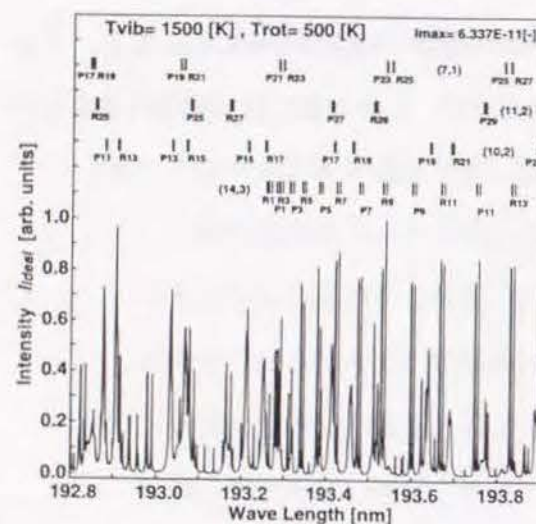
(d) $T_{rot} = 300K$



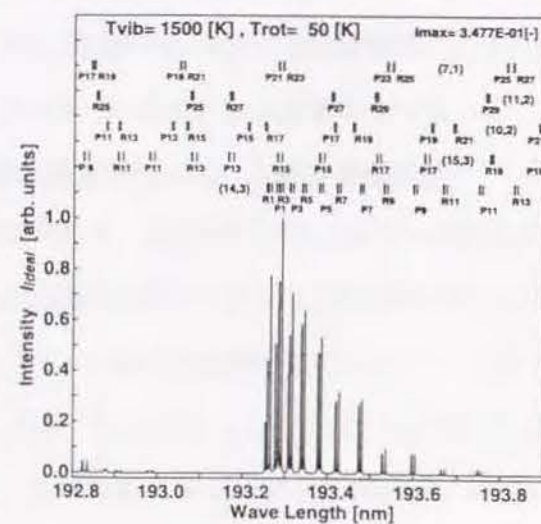
(b) $T_{rot} = 1000K$



(e) $T_{rot} = 100K$

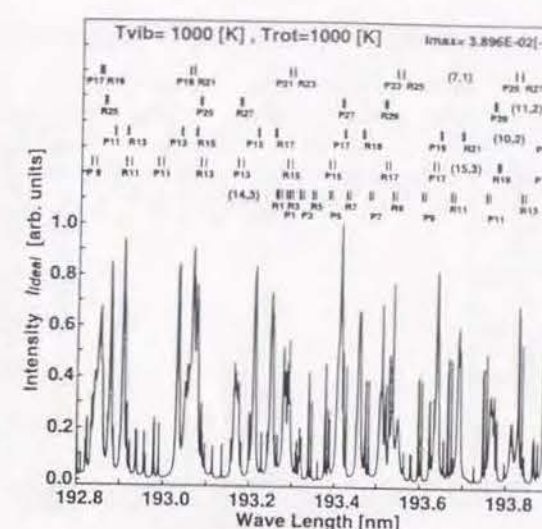


(c) $T_{rot} = 500K$

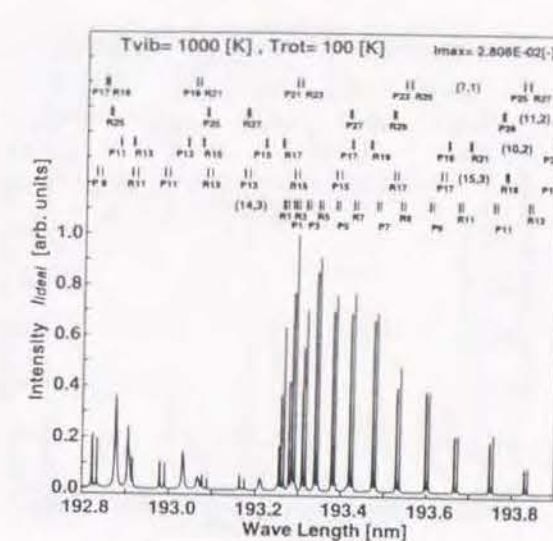


(f) $T_{rot} = 50K$

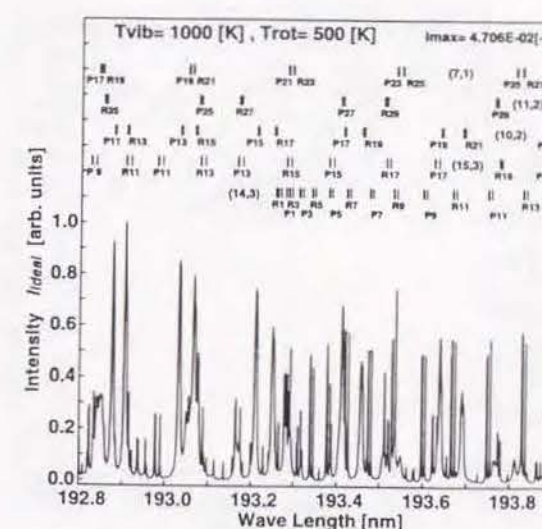
図2.23 ArF* エキシマレーザ波長域の回転スペクトルシミュレーション結果
($T_{vib} = 1500K$ の場合)



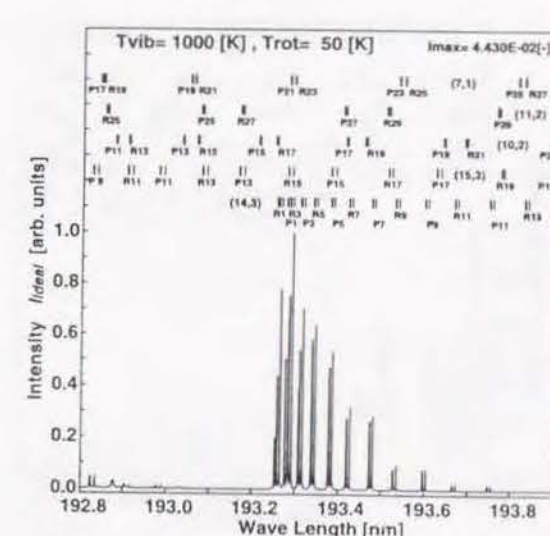
(a) $T_{rot} = 1000K$



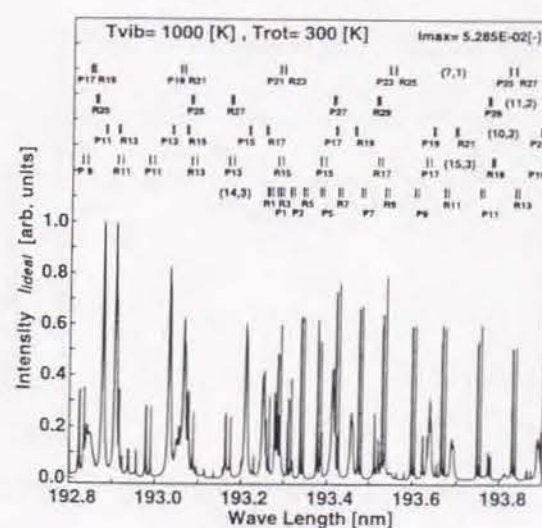
(d) $T_{rot} = 100K$



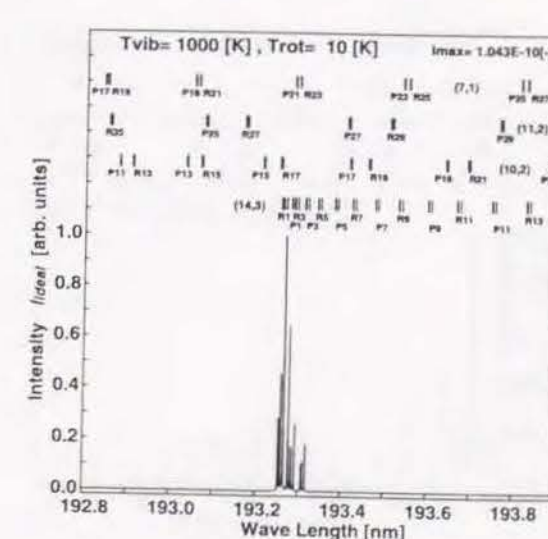
(b) $T_{rot} = 500K$



(e) $T_{rot} = 50K$

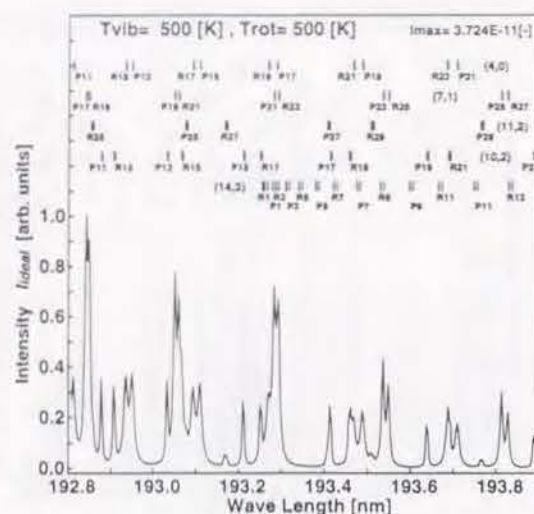


(c) $T_{rot} = 300K$

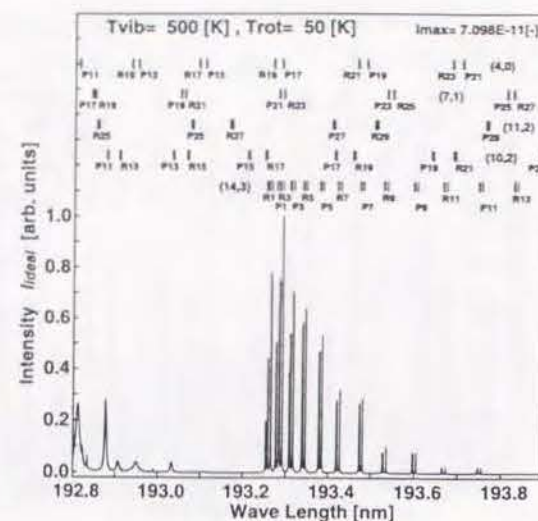


(f) $T_{rot} = 10K$

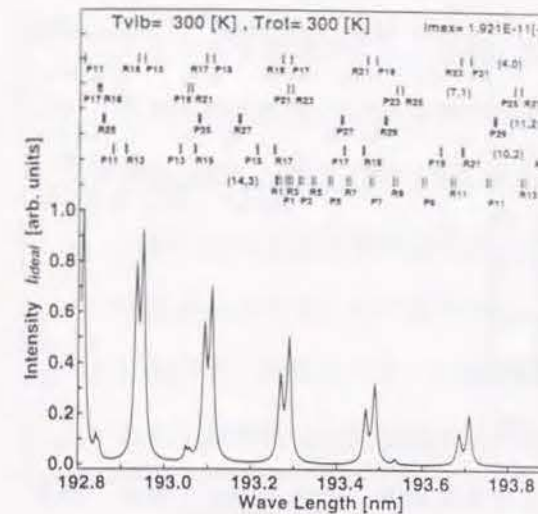
図2.24 ArF* エキシマレーザ波長域の回転スペクトルシミュレーション結果
($T_{vib} = 1000K$ の場合)



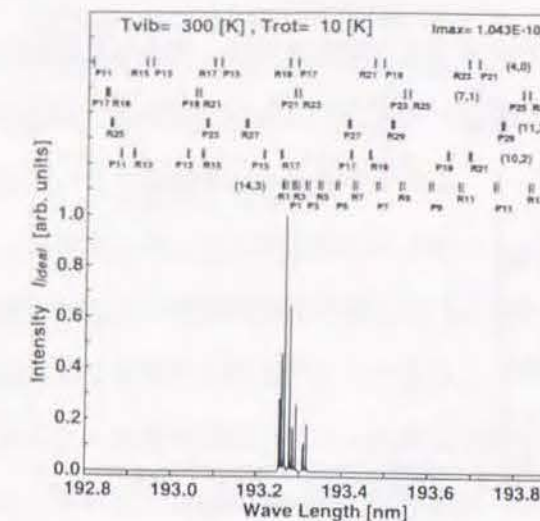
(a) $T_{rot} = 500K$



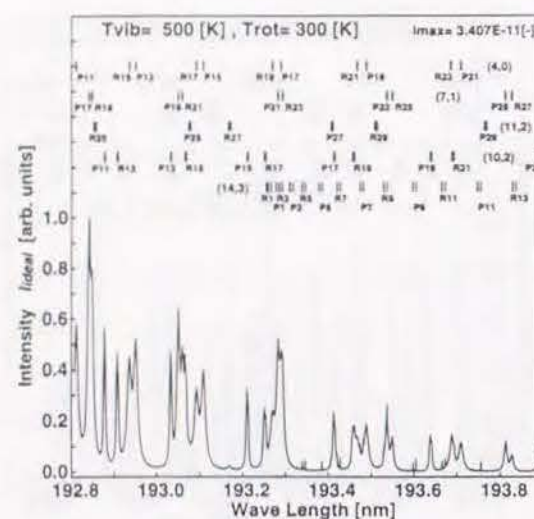
(d) $T_{rot} = 50K$



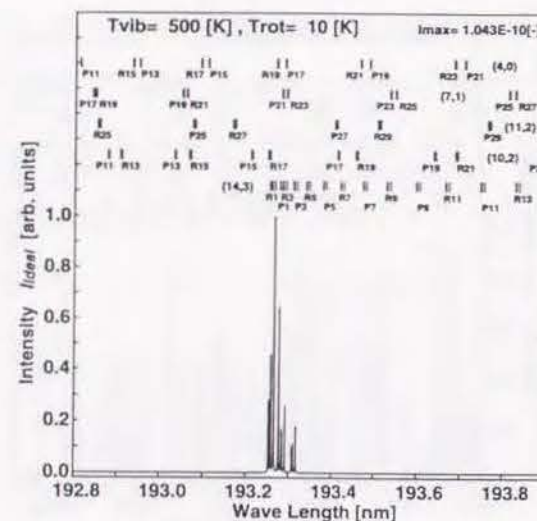
(a) $T_{rot} = 300K$



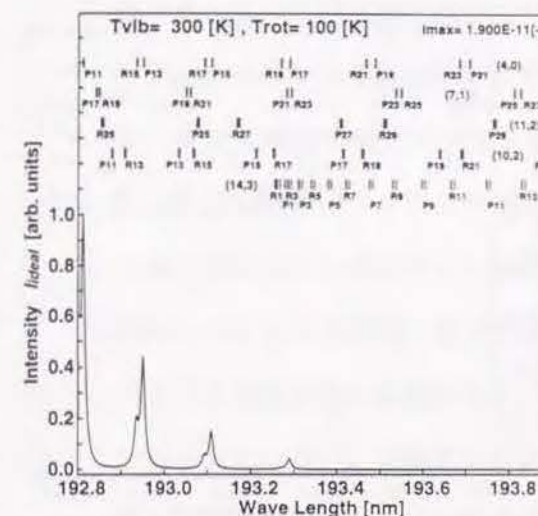
(d) $T_{rot} = 10K$



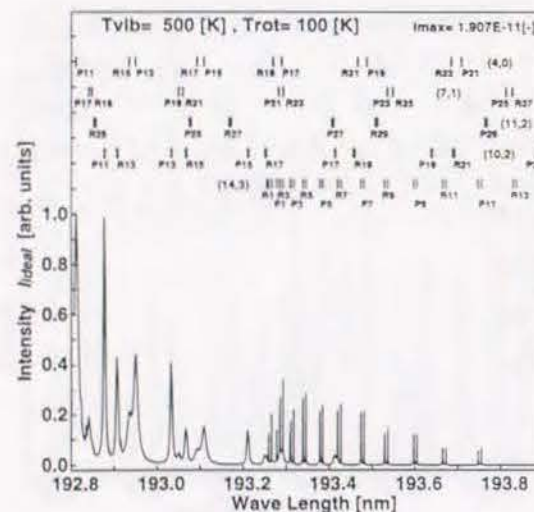
(b) $T_{rot} = 300K$



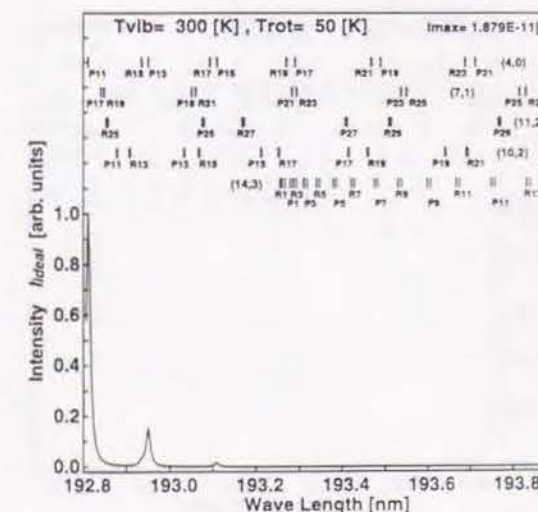
(e) $T_{rot} = 10K$



(b) $T_{rot} = 100K$



(c) $T_{rot} = 100K$



(c) $T_{rot} = 50K$

図2.25 ArF* エキシマレーザ波長域の回転スペクトルシミュレーション結果
($T_{vib} = 500K$ の場合)

図2.26 ArF* エキシマレーザ波長域の回転スペクトルシミュレーション結果
($T_{vib} = 300K$ の場合)

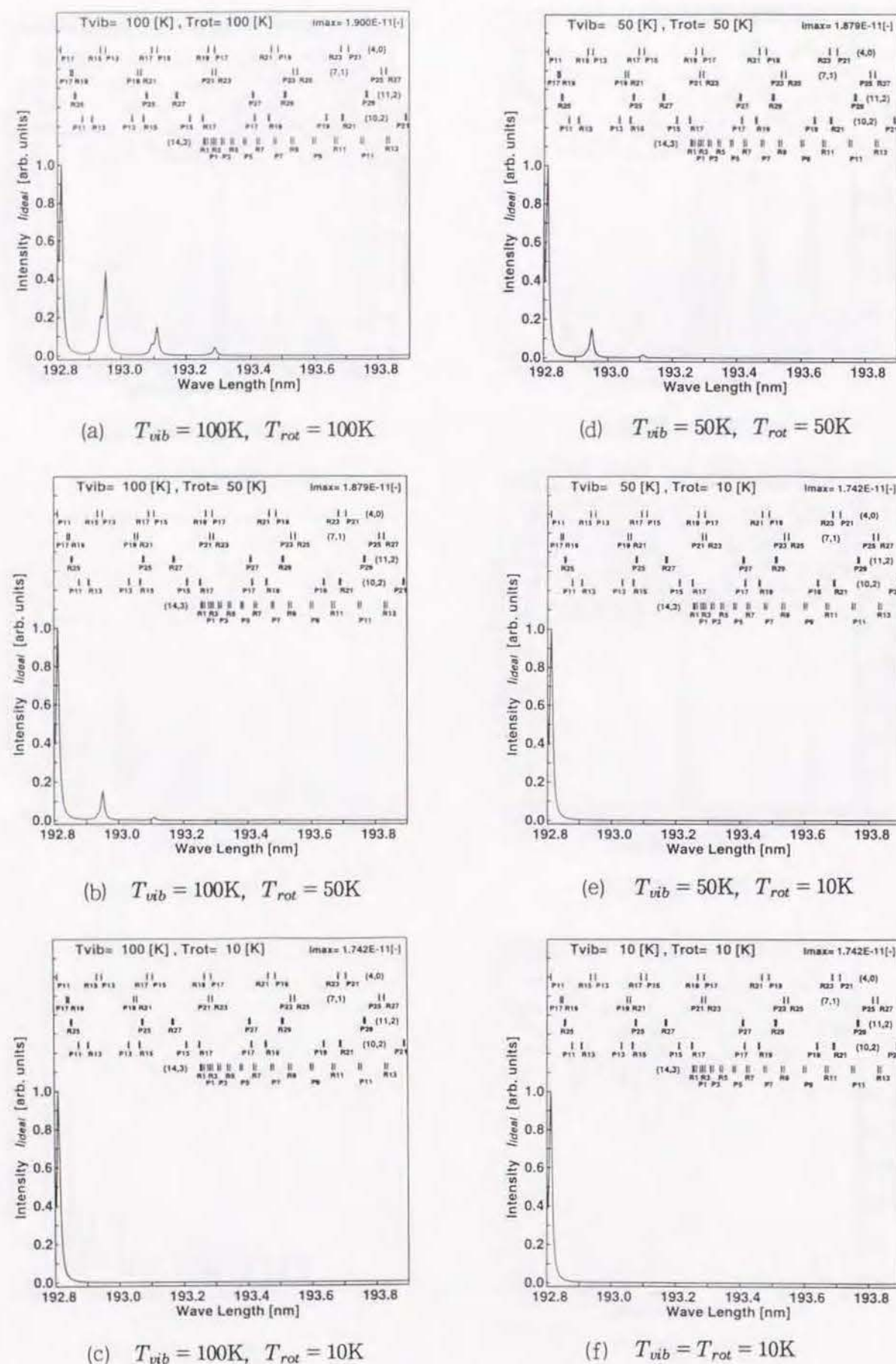


図2.27 ArF* エキシマレーザ波長域の回転スペクトルシミュレーション結果
($T_{vib} = 100\text{K}$, $T_{vib} = 50\text{K}$, $T_{vib} = 10\text{K}$ の場合)

2.3.5.3 温度測定において重要な遷移バンド

2.3.5.1 節及び2.3.5.2 節においては酸素分子の選択した代表温度ごとに個別にスペクトル特性を論じた。本節では O_2 -LIPFを用いた温度測定において注目すべき遷移バンドを総括し、 O_2 -LIPFを用いた温度測定において、注意すべき点をまとめる。

表2.13に各温度領域における支配バンドをまとめた。この表において支配バンドの意味するところは、ArF*エキシマレーザを用いた O_2 -LIPF温度測定で得られるスペクトルにおいて、回転スペクトル線の同定が可能であると考えられるバンドである。スペクトルから具体的に回転温度を求めるには、まとまった数の回転スペクトル線に対応するブラッチ番号を同定する必要があることから、かかるバンドのうちにも回転温度の測定に利用できないものもある。そこで、回転温度の測定に利用可能な重要バンドに(*)印を付けた。 O_2 -LIPF実験では(*)付きのバンドに注目すべきである。

$T_{vib} \leq 500\text{K}$ かつ $T_{rot} \leq 50\text{K}$ 温度領域では、2.5.3.2 節で述べたように、ArF*エキシマレーザ波長域内の蛍光スペクトル強度が弱く実験はかなり困難と予想されるので、表2.13の該当欄のバンドには(*)印をつけなかった。

表2.13からわかるように、①高振動温度、高回転温度程蛍光スペクトル強度は強いもののスペクトルが複雑、②低振動温度、低回転温度程スペクトルはシンプルだが蛍光スペクトル強度が弱い性質がある。したがって、どの温度領域に対しても O_2 -LIPFが適用できる訳ではない。本論文の次第3章では O_2 -LIPFの適用を試みるが、現時点において最も実験がやり易い二つの温度条件

領域Ⅰ： $T_{vib} \sim 1000\text{K}$, $T_{rot} \leq 100\text{K}$

領域Ⅱ： $T_{vib} \sim 1000\text{K}$, $100 \leq T_{rot} \leq 1000\text{K}$

について実験的検討を行うこととする。他の温度条件への拡張は今後の課題である。

表2.13 各温度領域における支配バンド一覧

$T_{rot}[K]$ $T_{vib}[K]$	10	50	100	300	500	1000	1500
10	(4, 0)						
50	(4, 0)	(4, 0)					
100	(4, 0)	(4, 0)	(4, 0)*				
300	(14, 3)	(4, 0)	(4, 0)*	(4, 0)* (7, 1)			
500	(14, 3)	(4, 0) (10, 2) (14, 3)	(4, 0) (10, 2) (14, 3)*	(4, 0) (7, 1)* (10, 2)	(4, 0) (7, 1)* (10, 2)		
1000	(14, 3)*	(14, 3)*	(10, 2) (14, 3)* (15, 3)	(2, 1) (10, 2) (14, 3)* (15, 3)	(7, 1) (10, 2)* (11, 2) (14, 3) (15, 3)	(7, 1) (10, 2)* (11, 2) (14, 3) (15, 3)	
1500	(14, 3)*	(14, 3)*	(10, 2) (14, 3)* (15, 3)	(7, 1) (10, 2) (11, 2) (14, 3)* (15, 3)	(7, 1) (10, 2) (11, 2) (14, 3)* (15, 3)	(7, 1) (10, 2)* (11, 2) (14, 3) (15, 3)	(7, 1) (10, 2)* (11, 2) (14, 3) (15, 3)

* は特に重要なバンド

2.4 結 言

振動・回転温度非平衡状態の希薄気体流れの温度測定に O_2 -LIPFを適用する実験を想定して、 O_2 -LIPFの回転スペクトルの特性を理論的に検討し、本章2.1に記載した4つの狙いそれぞれに対して、次の結論を得た。

- (1) O_2 -LIPFでは $B^3\Sigma_u^-$ の前期解離の影響により、温度一定の条件下であれば 10^6 Pa程度の高い圧力域まで蛍光スペクトル強度と気体の数密度の線型関係が得られる。この領域では、 O_2 -LIPF法を適用した温度計測が可能である。
- (2) 2原子分子を対象とするレーザ誘起蛍光法において、電子スピンによる多重項効果も含めた回転スペクトル解析手法を一般的に提示し、従来取扱われていない振動・回転温度非平衡状態の場合にも使用できる回転スペクトルシミュレーションコードを確立した。
- (3) O_2 -LIPFを実際に応用する可能性が高い振動温度 $T_{vib} \leq 1500K$ 、回転温度 $T_{rot} \leq 1500K$ の温度領域に対して、スペクトルシミュレーションを行い、スペクトルの特性と温度測定の可能性との関連を明らかにした。
- (4) シューマン・ルンゲ・バンドを対象として O_2 -LIPFによる温度測定を行う場合、原理的には適切な励起用レーザの波長域としては177~179nm, 183~185nmなどが望ましいが、現在商用レーザとして入手可能なArF*エキシマレーザ波長域(192.9~193.8nm)も実用的可能な波長域である。この時、ArF*エキシマレーザ波長域で強く表われるバンドは(4, 0)(7, 1)(10, 2)(11, 2)(14, 3)(15, 3)であるが、各温度領域において支配バンドは異なる。

第 3 章

0₂-LIPFによる温度測定実験

3.1 緒言

第2章において酸素分子(O_2)を対象分子とするレーザ誘起蛍光法(O_2 -LIPF)による温度測定 of 理論的側面について検討を行った。その結果として、実験結果として得られるスペクトルを解析して気体温度を推算する場合に有用となるスペクトルシミュレーションコードを完成し、それを実際に用いて分子の内部自由度(振動、回転、並進)に温度非平衡がある場合をも含む広範囲な温度条件下の希薄気体流れにおいて、スペクトルと温度との対応関係を読み取る際に注目すべき重要な遷移バンドを指摘することが出来た。

そこで、本章においては第2章で記述した O_2 シューマン・ルンゲ・バンドシミュレーションコードを活用して、 O_2 -LIPF法によって実際に温度測定を行った結果について述べる。第1章1.3.2(a)で述べた理由から、本研究では O_2 -LIPF法によって O_2 の回転温度を測定する。

本章では回転温度測定用の流れ場として、温度非平衡性を含み、流れの諸量が明確に知られている軸対称超音速自由噴流を選んだ。真空中へ噴出する軸対称自由噴流は工業上もしばしば用いられ、一般的希薄気体流れを再現すると云う意味でも適切である。 O_2 -LIPF法の試みは過去にいくつかなされているものの(例えば、 KrF^* エキシマレーザ(248nm)を用いた例は文献[F5]、 ArF^* エキシマレーザを用いた例は文献[F4, F11, F12, F14]などがある)、非平衡状態に着目した検討例は見当たらない。本研究はこの点に特色を有している。

なお、本章で記述する実験はドイツ航空宇宙研究所(DLR)*1ゲッティンゲンの真空風洞を用いて実施されたものである。

本章で記述する実験の狙いは次のようである。その第1は、第2章において確立したスペクトルシミュレーションコードから得られる理想スペクトルと実際のスペクトル形状の相違点を明らかにし、 O_2 -LIPFによって得られるスペクトル形状解釈をより正確に行うために、第2章のコードを実際のスペクトル形状を予測し得るコードに拡張する。また、 O_2 -LIPFの温度測定を実際に行う場合に留意すべき点を明らかにすることである。その第2は、第2章において蛍光スペクトル強度が強く、スペクトルもシンプルであると予測された温度域

$$T_{vib} \approx 1000K$$

$$T_{rot} \leq 100K$$

において、 O_2 -LIPFによる非平衡温度場の温度測定ができるか否かを実際に調べることである。また、次の狙いとして蛍光スペクトル強度が強いものの、スペクトルがやや複雑な温度領域

*1 Deutsche Forschungsanstalt für Luft-und Raumfahrt

$$T_{\text{rot}} \approx 1000\text{K}$$

$$100\text{K} \leq T_{\text{rot}} \leq 1000\text{K}$$

において、 O_2 -LIPFによる非平衡温度場の温度測定が可能かどうか吟味する。

最後に、以上の検討を総合して、 ArF^* エキシマレーザ波長域においても(14, 3)(7, 1)(10, 2)(11, 2)バンドに注目すれば非平衡温度測定が可能であることを検証する。

3.2 実験で得られるスペクトル形状の特徴

O_2 -LIPF実験では、有限な線幅を持ったレーザ波長を連続掃引しながら、蛍光信号を観測する。このため、通常、信号の積算時間内の平均蛍光強度を観察するので、式(2.10)に示したように、現実には得られるスペクトルは図2.22～図2.27に示した理想形とは異なって、そのなまった形状になる。とくに O_2 シューマン・ルンゲ・バンドにおいては、上位準位($B^3\Sigma_u^-$)が $^5\Pi_u, ^3\Pi_u$ などの状態と重なっていることから、前期解離しており、しかも図2.6で見たように振動準位ごとに異なった前期解離線幅を有しており、その影響でスペクトル形状のなまり方は、振動準位ごとに異なるので、この点について十分に注意が必要である。本節では、 O_2 -LIPF法を用いて軸対称自由噴流の回転温度の測定を行う準備として、実際に得られるスペクトル形状が第2章で解析した理論スペクトル形状とどのように相違するか検討する。

3.2.1 前期解離線幅の効果

図3.1にスペクトル線強度が同一(蛍光光子数が同一)で異なった前期解離線幅を有する回転スペクトル線を2種類、すなわち、前期解離線幅の狭い(14, 3)バンドと、前期解離線幅の広い(10, 2)バンドを比較した。前期解離線幅は均一幅に属するので、スペクトル線はローレンツ型スペクトル形状を示し、それはVoigt関数で記述できる。2本の線は強度が等しいにもかかわらず明らかに高さが異なることがわかる。

3.2.2 レーザ掃引波長ステップ幅の効果

スペクトル形状を正確に測定するためには、無限小の線幅のレーザ光と無限小の波長ステップ幅による掃引が理想的であるが、実際に用いられる ArF^* エキシマレーザの線幅は 0.5cm^{-1} であり、また、蛍光測定に必要なボックス・カー積分器等を用いた蛍光測定では、測定時間に上限があることから有限の波長ステップごとに全波長域を掃引せざるを得ず、従ってレーザ線幅、レーザ掃引波長ステップ幅共に有限の値となる。故に、 O_2 -LIPFによって得られるスペクトルはデジタル化された段階状の形状となる。本節では、レーザ掃引波長ステップ幅が有限であることのスペクトル形状に及ぼす影響について検討する。

図3.2に同一の原形スペクトル線を異なったレーザ掃引波長ステップ幅を用いて測定する場合に得られるスペクトル形状の相違例を示す。二等辺三角形形状の原形スペクトル線をスペクトル線の底辺と同じレーザ掃引波長ステップ幅、及び、その1/3のレーザ掃引波長ステップ幅にてスペクトル形状を測定する場合を比較している。レーザ掃引波長ステップ幅内の平均分子数がスペクトル強度として測定されるので、図3.2の左側の場合には原形スペクトル線の高さがほぼそのまま観測されているが、右側の場合にはスペクトル線の

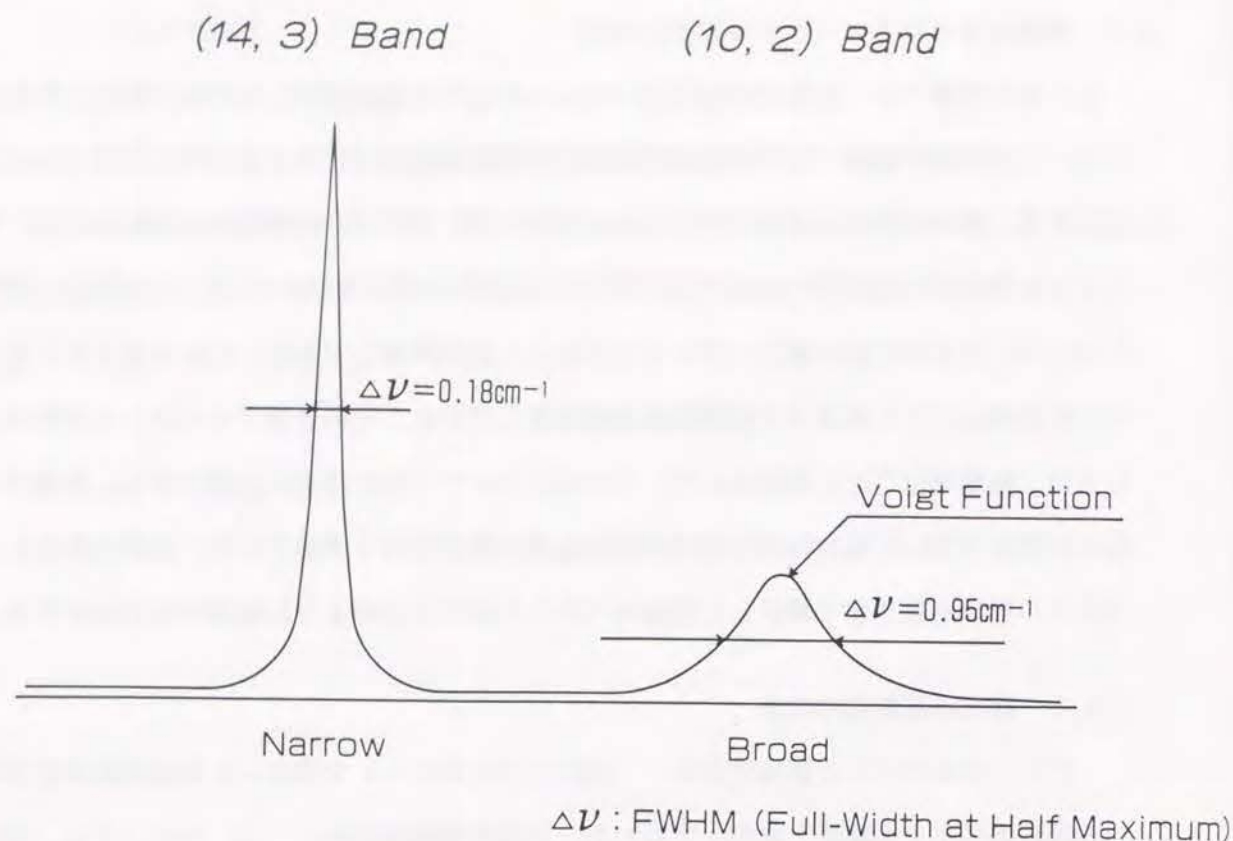


図3.1 前期解離線幅の影響によるスペクトル形状の相違

高さは1/2となっている。すなわち、レーザ掃引波長ステップ幅が広いとスペクトル線はなまって観測され、ピークが低くなる。同一のレーザ掃引波長ステップ幅で測定を行う場合でも、狭い前期解離線幅を有する(14, 3)バンドにおいては、広い前期解離線幅の(10, 2)バンドに比べてよりなまった形状のスペクトルが観察され、その結果みかけ上スペクトル強度が弱く観察される可能性がある。商用のArF*エキシマレーザは通常 0.5 cm^{-1} 以上の線幅であるから、 0.5 cm^{-1} 以下の前期解離線幅を有する $\nu' > 11$ のバンド、特に(14, 3)バンド中の回転スペクトル線はなまって観測される程度が大きく、注意を要する。

図3.3(a)に $T_{\text{vib}} = T_{\text{rot}} = 1000 \text{ K}$ の温度平衡気体に対する理想スペクトル形状を、また同図(b)にレーザ線幅 $\delta\nu_L = 0.5 \text{ cm}^{-1}$ 、レーザ掃引波長ステップ幅 $\delta\nu = 1.0 \text{ cm}^{-1}$ の条件で測定する場合に得られる予想スペクトル形状を示す。(b)で仮定したレーザ掃引波長ステップ幅は10パルス/s、蛍光信号積算回数16パルスでArF*エキシマレーザの中心波長域[193.1, 193.7]を約5分で掃引する実験に対応する。図3.3から(14, 3)バンドのピークが全体的に低下すること、互いに近接する回転スペクトル線が同化してしまいブランチ番号を同定することが困難となることがわかる。他と同化した回転スペクトル線の強度分布からは、もはや式(2.5)及び式(2.6)から示唆される $\ln I_{J'', J''}^{\nu', \nu''}$ の $F''(J'')$ に対する線型勾配から回転温度 T_{rot}

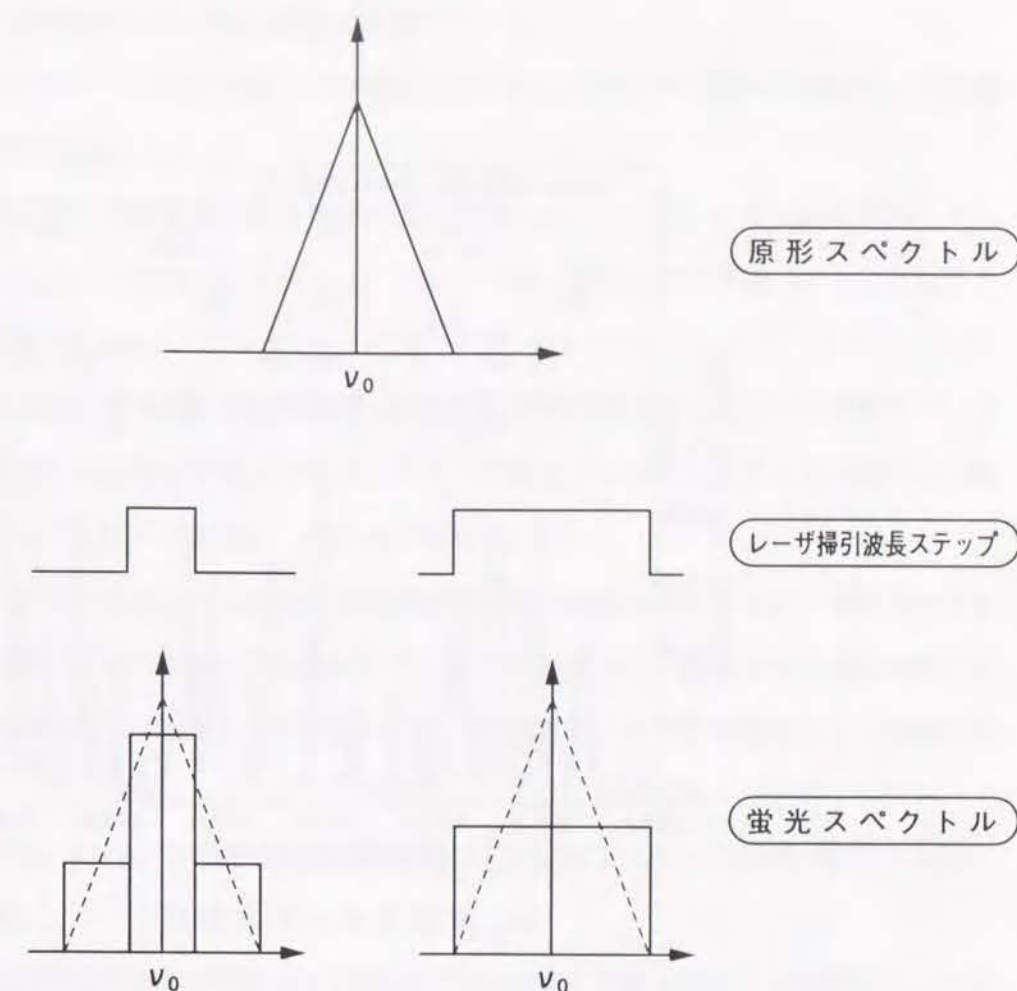
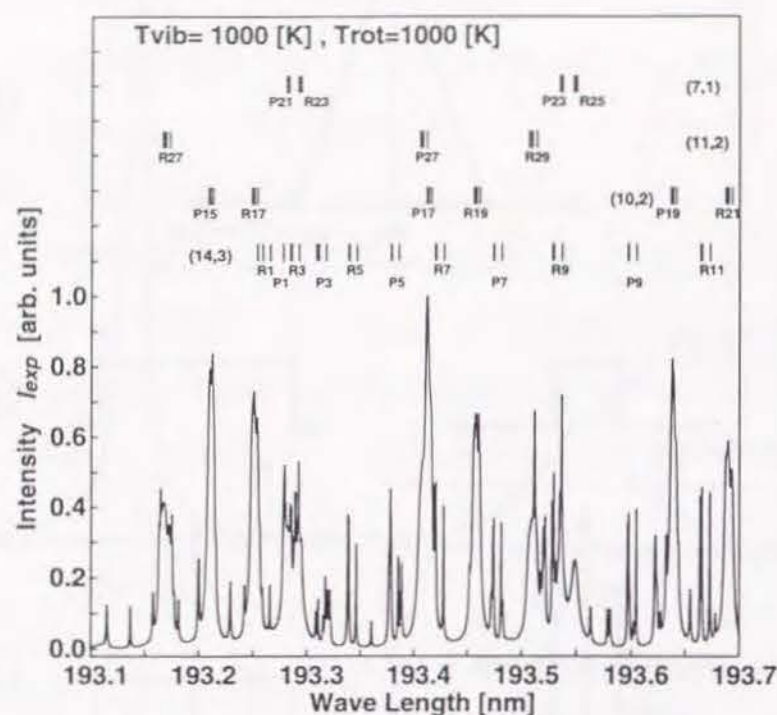
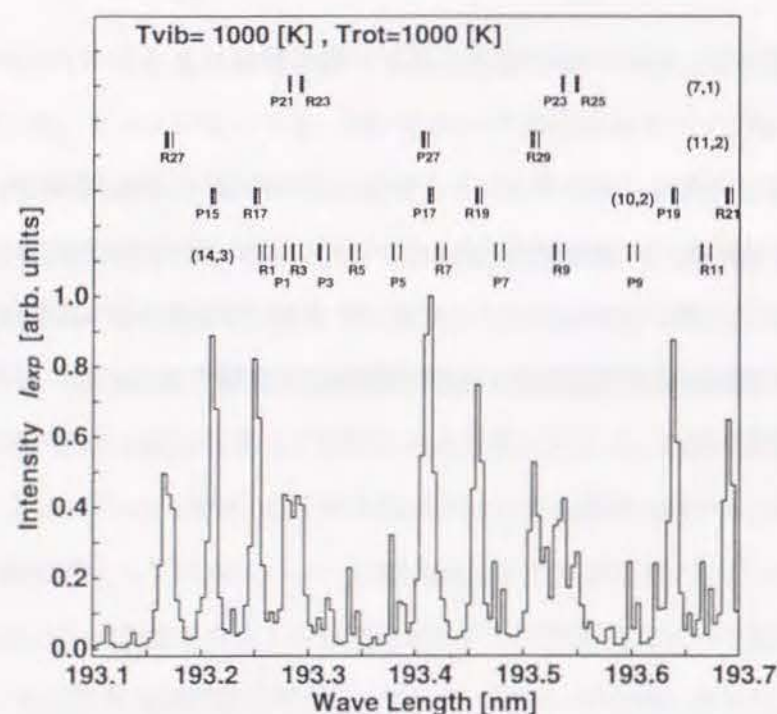


図3.2 レーザ掃引波長ステップ幅の影響によるスペクトル形状の相違

を求めること（ボルツマンプロットと云う）はできない。かかる場合に回転温度の測定精度を確保するには、(i)実験で得られたスペクトルから同一バンド内の回転スペクトル線のみを選び出し、ボルツマンプロットする、(ii)本章で示したシミュレーション法により、スペクトルの重複による線型勾配の誤差を理論的に見積り補正する、などが有効な代替手段として考えられる。



(a) 理想スペクトル形状



(b) O_2 -LIPF実験で得られると予想されるスペクトル形状

図3.3 レーザ掃引波長ステップ幅の影響によるスペクトル形状の相違計算結果

3.2.3 実験で得られるスペクトル形状の予測

ArF*エキシマレーザを用いた O_2 -LIPF実験で得られるスペクトル形状の特徴を、各温度条件ごとに検討する。

振動・回転温度が平衡状態にある気体の場合に対するシミュレーション結果を図3.4に示す。図中ではレーザ線幅 $\delta\nu_L = 0.5 \text{ cm}^{-1}$ 、レーザ掃引波長ステップ幅 $\delta\nu = 1.0 \text{ cm}^{-1}$ として計算してある。

振動・回転温度平衡気体の場合の理想スペクトル形状の回転スペクトルの特徴については既に第2章図2.22において論じてある。図3.4の場合でも回転スペクトルの形状は大略は理想スペクトルと同一であるが、次の点で異なる。

- (i) (14, 3)(15, 3)バンドなどの前期解離線幅の狭い回転スペクトルは、理想スペクトル上では高いピークを有して比較的目立っていたのに対し、図3.4では高さが低くなまって測定され、スペクトル中で強い(10, 2)(11, 2)バンドが一層際立って観測される。
- (ii) (7, 1)(4, 0)バンドなどの前期解離線幅の太い回転スペクトルは同一化しており、分離し難い。

振動・回転温度が非平衡状態にある気体の場合に対する理想スペクトル形状については図2.23～図2.27において既に検討した。この場合にもスペクトル形状の大略は図2.23～図2.27に示したそれと変わらないが、理想スペクトルとの間に平衡状態の気体に対して指摘した相違点がある。この場合の具体的なスペクトル形状については、次節で扱う $T_{vib} \approx 1000 \text{ K}$ の場合の軸対称自由噴流実験を想定した計算結果に関連して詳述する。

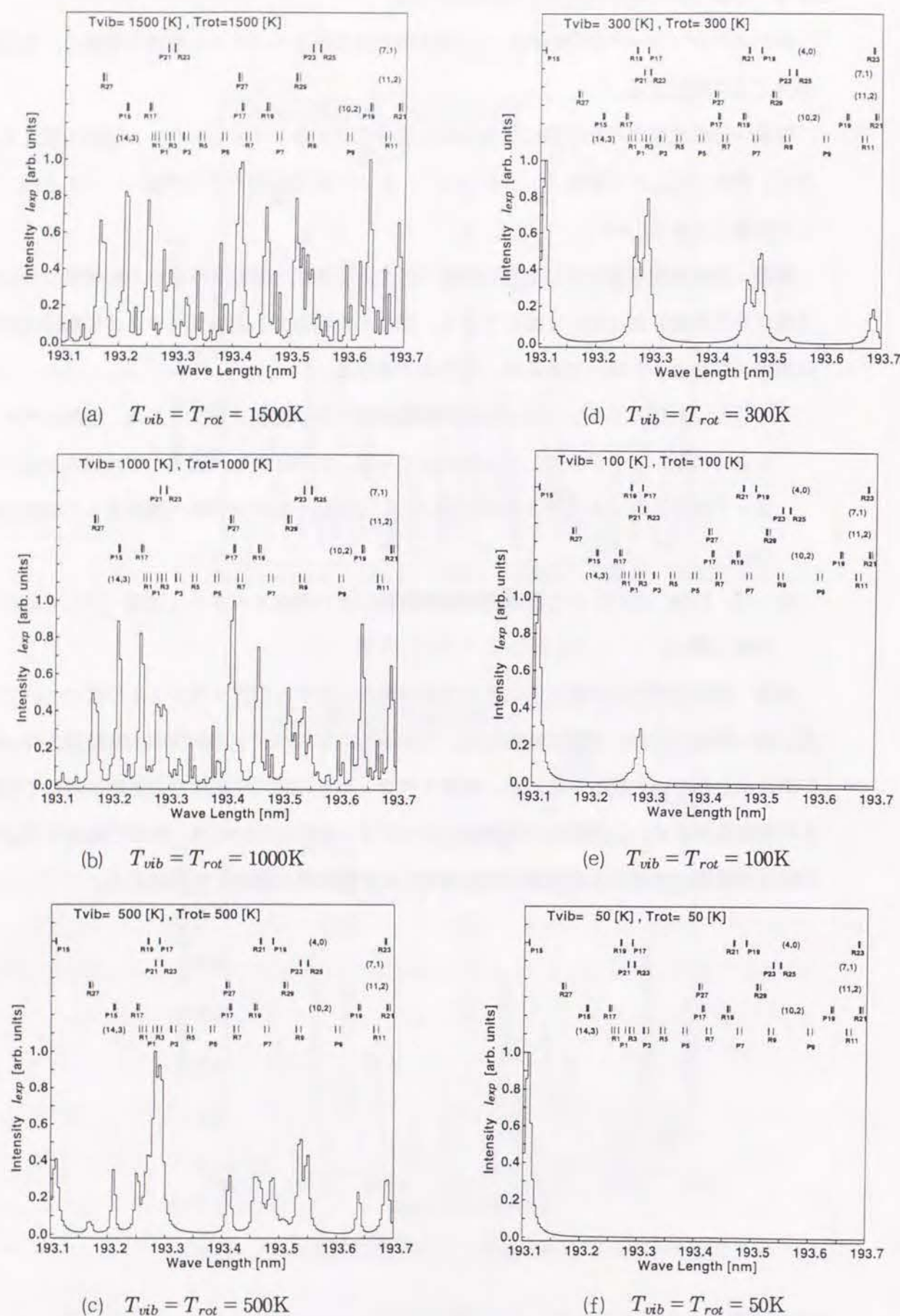


図3.4 O_2 -LIPF実験で得られると予想される理論スペクトル
(温度平衡気体の場合)

3.2.4 $T_{vib} \approx 1000K$ の軸対称自由噴流測定における回転スペクトル

この項では次節のArF*エキシマレーザを用いた O_2 -LIPF実験の結果を検討する前に軸対称自由噴流に対する測定で得られるべき回転スペクトルについて予めその特徴を吟味しておくことにする。

次節の実験では、よどみ点圧力 $P_0 = 2$ MPa, よどみ点温度 $T_{vib} = T_{rot} \approx 1000K$ の空気を用いるが、それを圧力 1 Pa以下の真空中へ噴出するので O_2 分子が振動緩和するのに十分な分子衝突回数は確保されない。このため、自由噴流中の振動温度はよどみ点振動温度とはほとんど変化しない状態で凍結され、ほぼ

$$T_{vib} \gg T_{rot} \approx T_{tr} \quad (3.1)$$

の関係が成立することが予想される。

そこで、図3.5に $T_{vib} = 1000K$ とし、回転温度のみを数種類に変化させた場合のスペクトルの計算結果を示す。回転温度が変化すると、強く観測される支配的なバンドが変化する。表3.1に温度領域によって強く観測されるバンドをまとめた。

T_{rot} が低い場合には(14, 3)バンドのみが支配的であるため、スペクトルの同定が容易である。また T_{rot} が高い場合にも(10, 2)(11, 2)(7, 1)バンドが支配的であり、スペクトルの同定は出来る。この結果を考慮して、次節以降の実験では遂行し易い実験を、

- (i) (14, 3)バンドが支配的な単純な軸対称噴流の回転温度測定
 - (ii) (10, 2)(11, 2)(7, 1)バンドが支配的なマッハディスク後の回転温度測定
 - (iii) (14, 3)(10, 2)(11, 2)(7, 1)バンドが混在する銅円板のまわりの回転温度測定
- の順で行う。

表3.1 $T_{vib} \approx 1000K$ の温度非平衡気体の温度測定における支配的な遷移バンド

(v', v'') Band	Temperature Regime (K)		
	$0 < T_{rot} < 200$	$200 < T_{rot} < 400$	$400 < T_{rot} < 1200$
(14, 3)	◎	○	△
(10, 2)	△	○	◎
(11, 2)	×	○	◎
(7, 1)	×	○	◎

◎: very remarkable, ○: remarkable, △: weak, ×: invisible

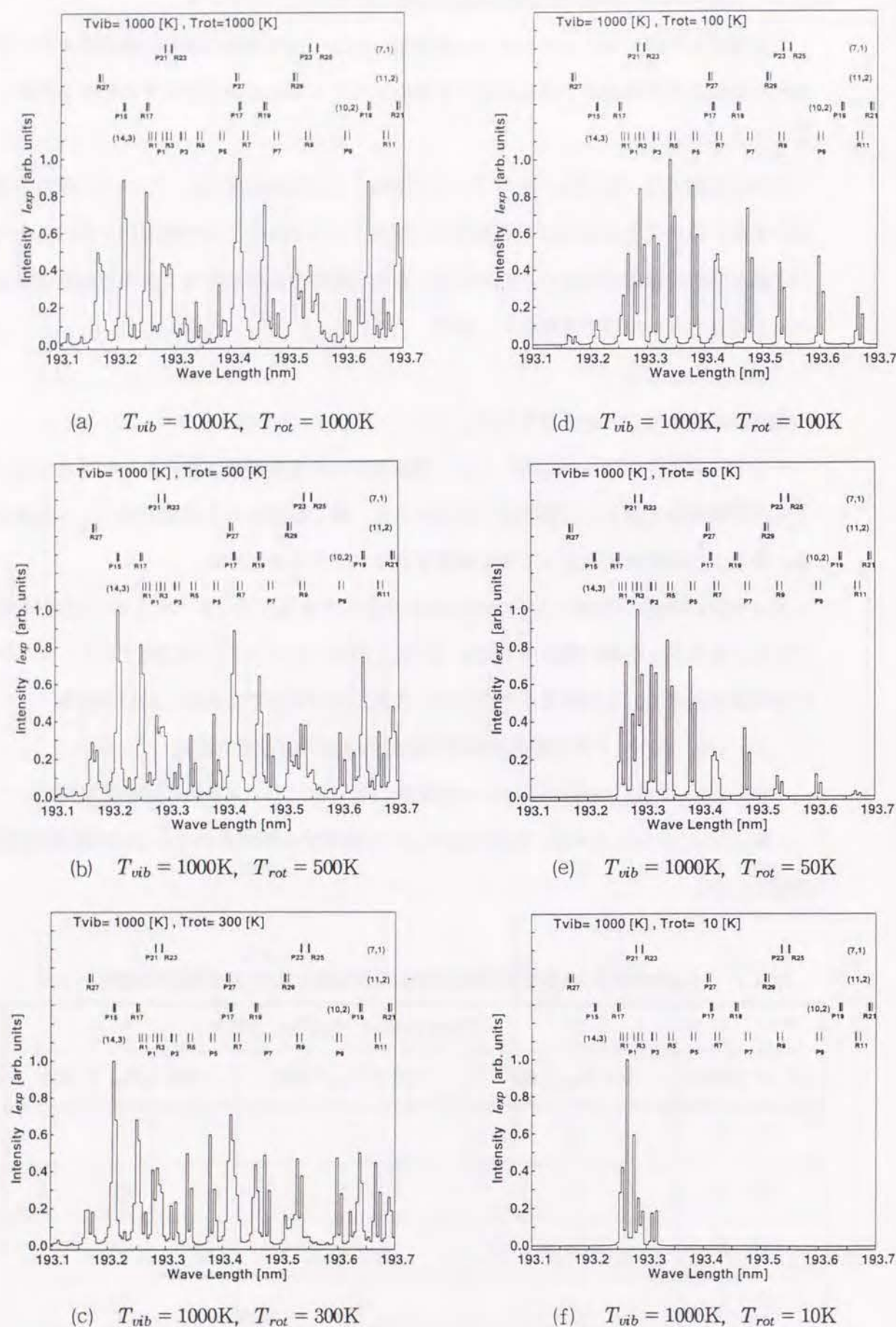


図3.5 O_2 -LIPF実験で得られると予想される理論スペクトル
(温度非平衡気体の場合)

3.3 O_2 -LIPFによる軸対称自由噴流の回転温度測定

本節では(14, 3)バンドが支配的な単純なスペクトル形状を示すと予想される自由噴流の100K以下の温度域を取り上げて、その中心軸上の回転温度分布測定を行い、第2章で示した O_2 シューマン・ルンゲ・バンドのシミュレーションコードから得られる理論結果と実現象の対応性を検討する。

O_2 -LIPF実験では、波長掃引可能な ArF^* エキシマレーザ(EMG160 TMS, Lambda Physik)を使用する。このレーザの性能は、掃引波長域192.9nm-193.8nm, 最大パルスエネルギー100mJ, パルス長13ns, 最大パルス繰り返し数250Hz, 最大レーザパワー15Wである。 ArF^* エキシマレーザの広い広がりを持つ紫外光を狭帯域化するために、DCモータ(Encoder Mike, Oriel)を用いた回折格子を使用する。狭帯域化された光(線幅 0.5cm^{-1})はさらに増幅するが、若干ながら広帯域のバックグラウンド光が残る。狭帯域化された光とすべての出力光の比をロッキング効率と定義する。分光器(Spectra Pro 500, 0.5m, 3600 溝/mm)を用いて測定したロッキング効率は40~60%の程度であった。

図3.6に模式的に回転温度測定のための軸対称超音速自由噴流を示す。図3.7に O_2 -LIPF回転温度測定用光学系を示す。図3.8, 図3.9は本実験を行ったドイツ航空宇宙研究所(DLR)ゲッティンゲンに設置されている真空風洞(V2G)の外観及び O_2 -LIPF光学系の外観写真である。レーザ光は真空風洞(V2G)のテストセクション(直径0.4m)の中心軸上に焦点を結ぶように導入される。 O_2 -LIPFにおける蛍光波長が220nm~400nmの波長域に存在する^[F3]ことを考慮して、200nm~450nmの波長の光を通すカラーフィルタ(Schott BG24)を用いて、石英レンズによって蛍光信号を紫外光用フォトマル(THORN, EMI 9789QB)に集光する。このフォトマルは180nmから650nmの光に対して検出能力がある。信号積分器(SR250, Stanford Research, Spectroscopy Instruments GmbH, Gilching)によって ArF^* エキシマレーザ掃引波長域を1600ステップ分、レーザショット数10Hzにて10パルスごとに平均化しながら蛍光信号を測定する。実験に用いたフォトマル電圧、信号積分器のゲート、ディレイはそれぞれ1200V, 40~60ns, 1.4 μs である。大気による ArF^* エキシマレーザ光の吸収(O_2 の(4, 0)バンドP17, P19, R19, R21ブランチによる吸収)減光を避けるために、レーザと風洞の間の光路は N_2 ガスパージした。蛍光信号を実験後規格化する目的に使用するために、実験中レーザ光の強度の時間的変動をモニターした。テストガスとしては貯気槽よどり点圧力 $P_0 = 2 \times 10^6 \text{ Pa}$, よどり点温度 $T_0 = 1180\text{K}$ である空気を用い、それを直径 $d^* = 0.7\text{mm}$ 円孔ノズルより1Paの真空中に噴出させて自由噴流を作る。レーザ位置は風洞内で固定しており、ノズル位置を風洞外より制

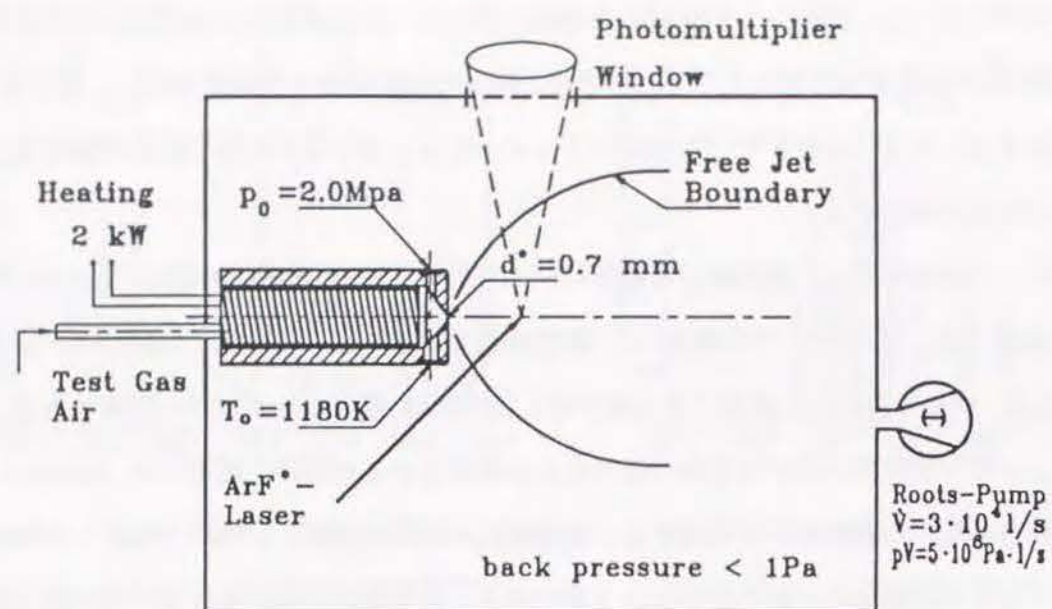


図3.6 V2G風洞における軸対称自由噴流（風洞内径0.4m）

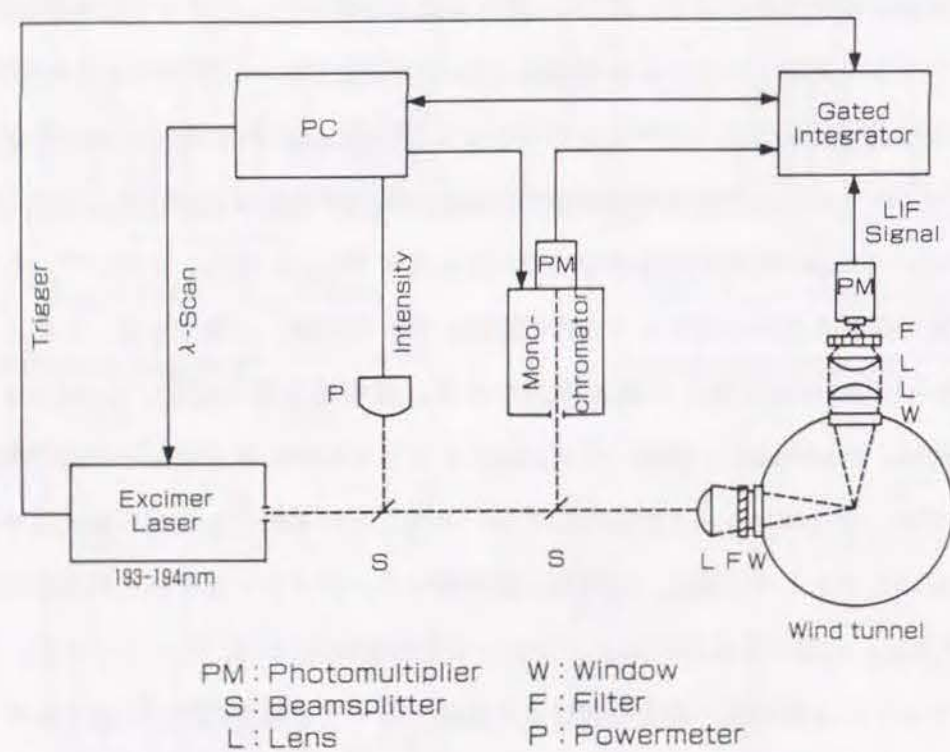


図3.7 O_2 -LIPF光学系

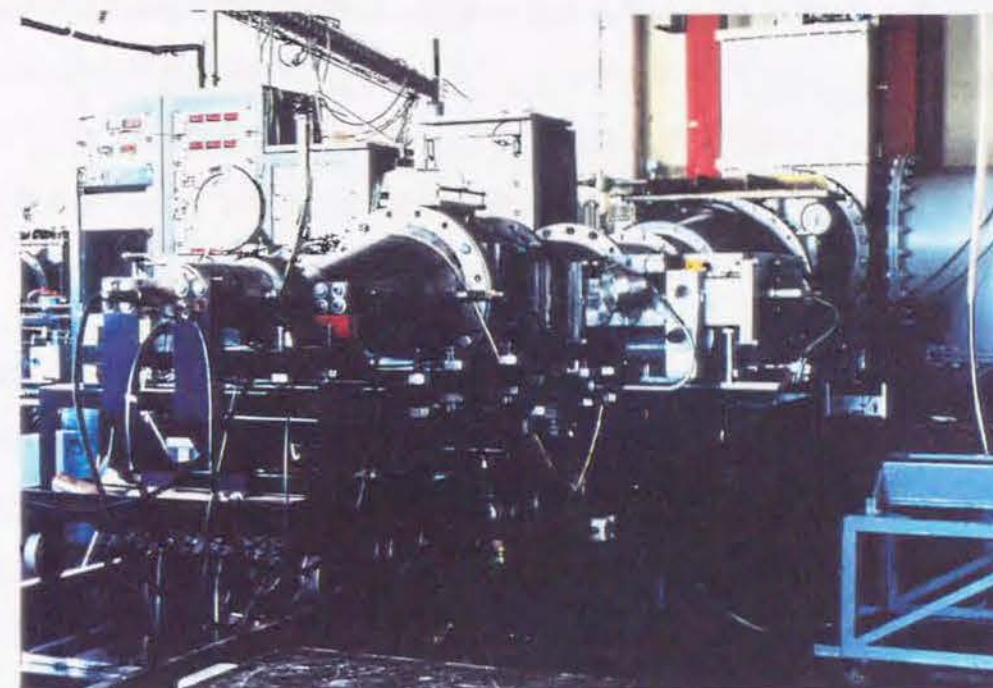


図3.8 真空風洞（V2G）の外観



図3.9 O_2 -LIPF光学系の外観

御して噴流軸方向に移動させることによって、自由噴流軸上の任意の点での測定が出来るようになっている。

図3.10に自由噴流ノズルの構造を示す。振動・回転温度の非平衡状態を作り出すために、1000Kレベルの高温ガスを噴出できるようにしてある。ガスの加熱を行うためにノズル内にカンタルヒータ(KANTAL APM, 線直径 1.7mm)がコイル状に内蔵されている。コイル状カンタルヒータは、アルミナ製円管の外面に沿うように巻いてあり、ヒータ全体をノズルボディ(材質INCOLOY 800 HT)内に収める。ノズルボディ先端には0.7φの孔があり、孔直前の空間部の圧力、温度を測定し、よどみ点圧力、及び、よどみ点温度とする。ノズルボディ全体は断熱材及び水冷管で覆われている。

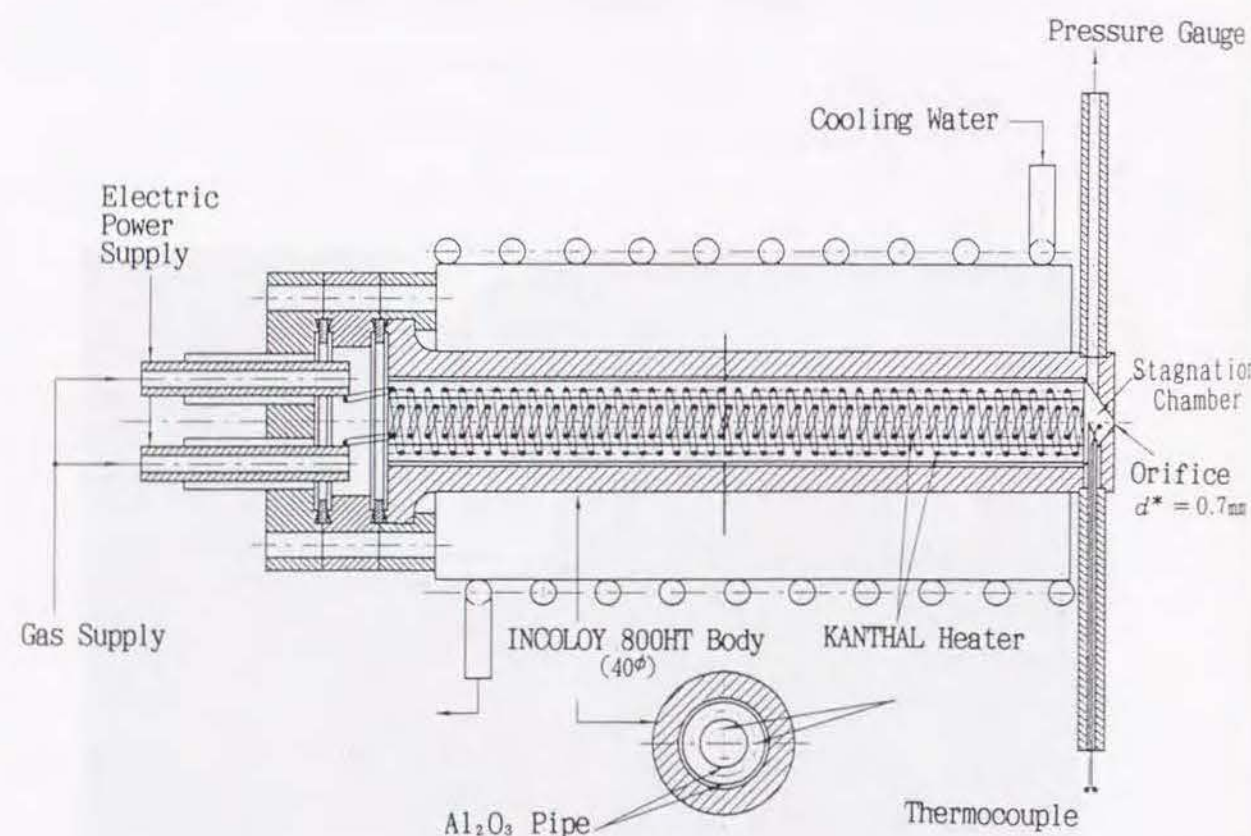


図3.10 自由噴流ノズルの構造

表3.2 自由噴流軸上の回転温度分布測定実験条件

実験No.	スロートからの距離 x [mm]	よどみ点圧力 [Pa]	よどみ点温度 [K]	背圧 [Pa]
1	5.0	2.02×10^6	1184	5.7
2	10.0	2.02×10^6	1183	5.7
3	25.0	2.00×10^6	1182	6.1

噴流ノズルスロートより下流の超音速流中 $x = 5, 10, 25\text{mm}$ ($x/d^* = 7.1, 14.3, 35.7$) の位置の噴流軸上で回転温度を測定した。表3.2に実験条件を示す。

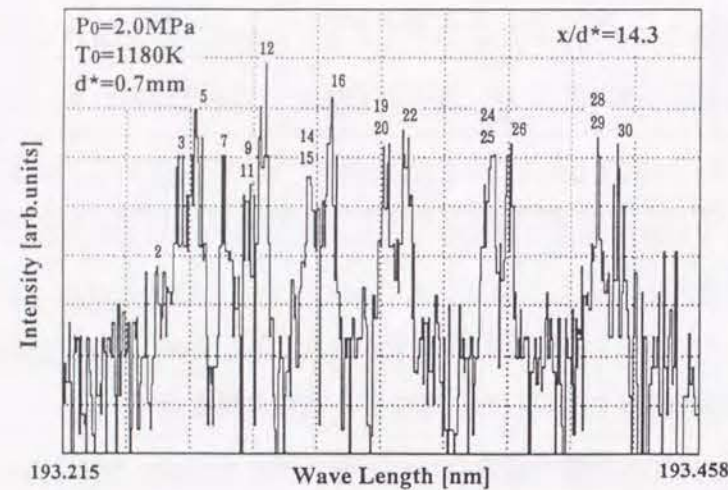
図3.11(a)に $x/d^* = 14.3$ の位置で測定された回転スペクトルを、図3.11(b)にこれと対応する線幅を無視した回転スペクトルシミュレーション結果を示す。図3.11(a)のスペクトルはレーザー出力強度により規格化して示してある。スペクトルピーク上の付番はブランチ番号及び量子数を列挙した表3.3中の番号に対応している。図3.11(a)と(b)は互いによく一致しており、スペクトルシミュレーションが妥当であり、スペクトル線に対応するブランチ番号の同定が正確に行えることがわかる。

図3.11(b)においては (14, 3) の主ブランチ R1, R3, R5, R7, P1, P3, P5 及び、サテライトブランチ $rQ_{21}1$, $pQ_{23}3$ などが同定可能である。なお、スペクトルの同定の際にはレーザー出力モニタにおいて若干の出力低下として現れる大気吸収波長点である (4, 0) バンドの R19 [$F_1: 193.2701\text{nm}$, $F_2: 193.2698\text{nm}$, $F_3: 193.2675\text{nm}$], P17 [$F_1: 193.2897\text{nm}$, $F_2: 193.2896\text{nm}$, $F_3: 193.2876\text{nm}$] を基準にすることが出来る。シューマン・ルンゲ・バンドはPブランチ、Rブランチともに本来 F_1, F_2, F_3 の3重項から成るが、実際には振動準位が $v' = 14$ の場合 F_2 と F_3 の波長差は前期解離線幅 (0.18cm^{-1}) と同一オーダーの大きさであるから、それらを互いに識別することが困難である。したがって、図3.11(a)では各ブランチはあたかも二重項であるかのように観測されている。バンドヘッド近傍のサテライトブランチは、非常に弱く回転温度を求める目的には使えそうにない。

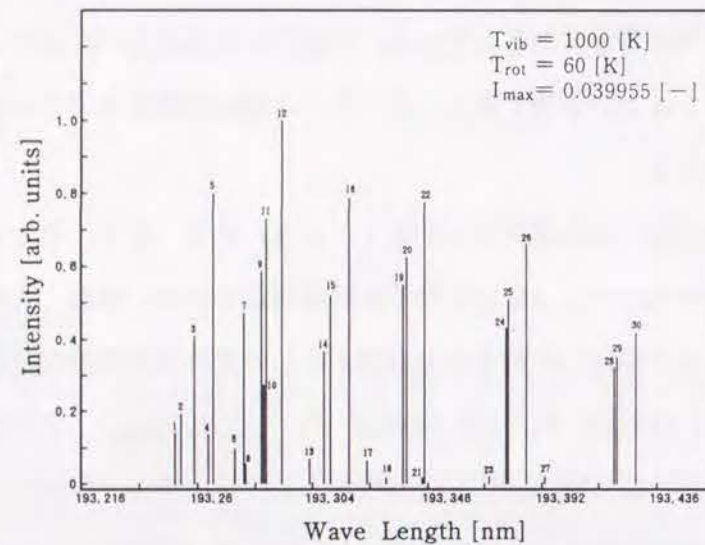
参考に本実験におけるレーザー出力と波長の関係の一例を図3.11(c)に示す。図3.11(c)は、図3.7の光学系中の出力メータにて測定された。図中の波長193.28nm近傍にあらわれる若干の出力低下は、上に述べた大気吸収点に対応し、193.4nm以上にあらわれる若干の出力低下はArF*エキシマレーザーの出力特性によるものである。ArF*エキシマレーザーは安定して作動していることがわかる。

表3.3 ブランチ番号一覧
02 Schumann-Runge Bands

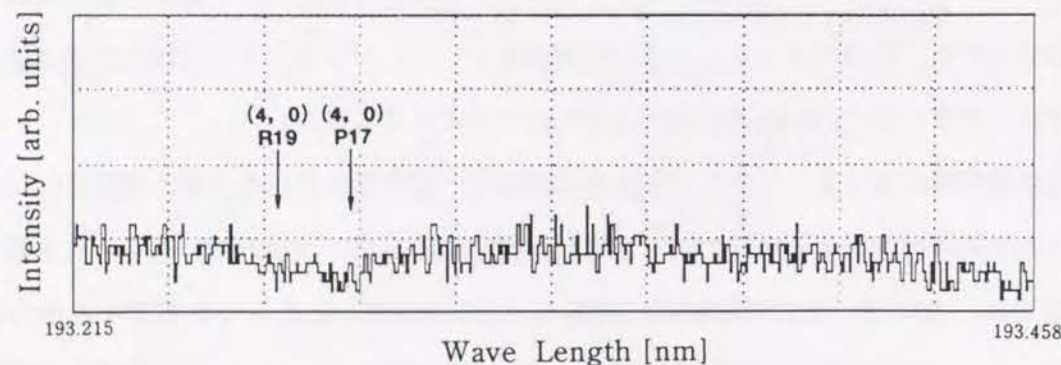
No.	X3sigma	B3sigma	Wave Length	Intensity	Band	Branch
	V K J	V K J	[nm] [1/cm]	[—]		
1	(3 1 2)	(14 2 2)	193.2517 51745.99	5.696E-03	(14, 3)	-rQ21-[1]
2	(3 1 0)	(14 2 1)	193.2539 51745.41	7.757E-03	(14, 3)	R3----[1]
3	(3 1 1)	(14 2 2)	193.2587 51744.10	1.633E-02	(14, 3)	R2----[1]
4	(3 1 1)	(14 2 1)	193.2642 51742.63	5.443E-03	(14, 3)	-rQ32-[1]
5	(3 1 2)	(14 2 3)	193.2657 51742.24	3.189E-02	(14, 3)	R1----[1]
6	(3 1 0)	(14 0 1)	193.2743 51739.93	3.878E-03	(14, 3)	pR13--[1]
7	(3 1 2)	(14 0 1)	193.2776 51739.05	1.898E-02	(14, 3)	----P1[1]
8	(3 3 4)	(14 4 4)	193.2781 51738.91	2.043E-03	(14, 3)	-rQ21-[3]
9	(3 3 2)	(14 4 3)	193.2843 51737.27	2.342E-02	(14, 3)	R3----[3]
10	(3 1 1)	(14 0 1)	193.2847 51737.16	1.089E-02	(14, 3)	-pQ12-[1]
11	(3 3 3)	(14 4 4)	193.2855 51736.95	2.925E-02	(14, 3)	R2----[3]
12	(3 3 4)	(14 4 5)	193.2922 51735.15	3.996E-02	(14, 3)	R1----[3]
13	(3 3 2)	(14 2 2)	193.3029 51732.27	2.732E-03	(14, 3)	-pQ23-[3]
14	(3 3 2)	(14 2 1)	193.3084 51730.80	1.475E-02	(14, 3)	----P3[3]
15	(3 3 3)	(14 2 2)	193.3107 51730.20	2.079E-02	(14, 3)	----P2[3]
16	(3 3 4)	(14 2 3)	193.3174 51728.40	3.152E-02	(14, 3)	----P1[3]
17	(3 3 3)	(14 2 3)	193.3247 51726.45	2.599E-03	(14, 3)	-pQ12-[3]
18	(3 5 6)	(14 6 6)	193.3319 51724.52	7.478E-04	(14, 3)	-rQ21-[5]
19	(3 5 4)	(14 6 5)	193.3384 51722.78	2.203E-02	(14, 3)	R3----[5]
20	(3 5 5)	(14 6 6)	193.3394 51722.52	2.495E-02	(14, 3)	R2----[5]
21	(3 5 5)	(14 6 5)	193.3459 51720.77	7.129E-04	(14, 3)	-rQ32-[5]
22	(3 5 6)	(14 6 7)	193.3463 51720.68	3.106E-02	(14, 3)	R1----[5]
23	(3 5 4)	(14 4 4)	193.3715 51713.93	8.975E-04	(14, 3)	-pQ23-[5]
24	(3 5 4)	(14 4 3)	193.3781 51712.16	1.745E-02	(14, 3)	----P3[5]
25	(3 5 5)	(14 4 4)	193.3790 51711.92	2.053E-02	(14, 3)	----P2[5]
26	(3 5 6)	(14 4 5)	193.3856 51710.16	2.651E-02	(14, 3)	----P1[5]
27	(3 5 5)	(14 4 5)	193.3931 51708.16	8.553E-04	(14, 3)	-pQ12-[5]
28	(3 7 6)	(14 8 7)	193.4195 51701.09	1.306E-02	(14, 3)	R3----[7]
29	(3 7 7)	(14 8 8)	193.4206 51700.80	1.415E-02	(14, 3)	R2----[7]
30	(3 7 8)	(14 8 9)	193.4278 51698.88	1.686E-02	(14, 3)	R1----[7]



(a) 自由噴流中で測定された(14, 3)バンドの回転スペクトル ($x/d^* = 14.3$)



(b) 回転スペクトルシミュレーション結果
(14, 3)バンド $T_{vib} = 1000K$, $T_{rot} = 60K$)



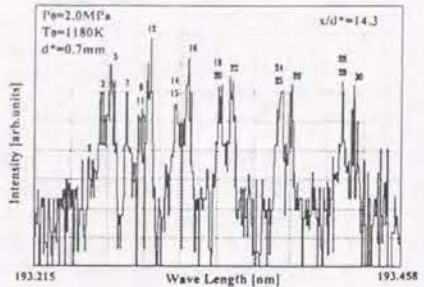
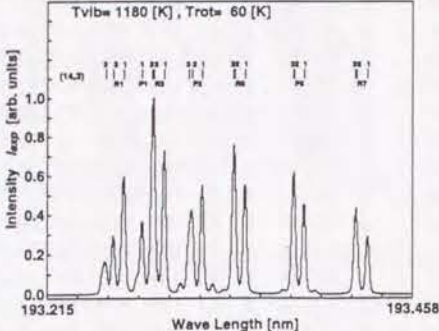
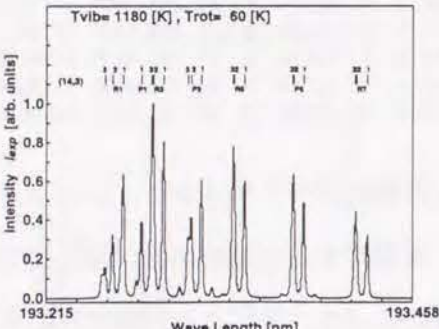
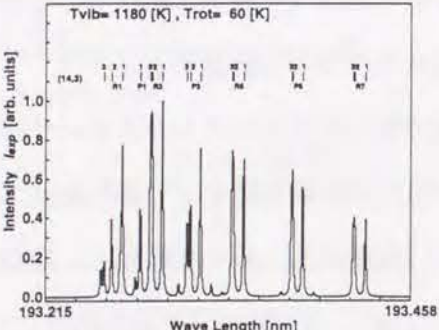
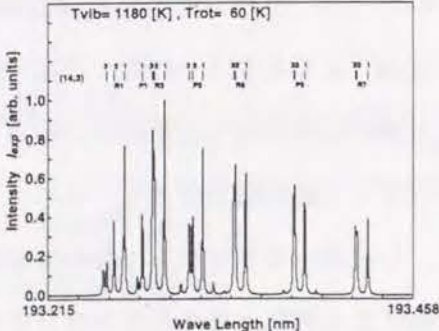
(c) レーザ出力測定結果

図3.11 実験で得られた回転スペクトルと計算結果の比較

線幅を考慮した回転スペクトルシミュレーションでは、レーザ線幅 $\delta\nu_L$ とレーザ掃引波長ステップ幅 $\delta\nu$ を設定する必要がある。図3.11(b)では、直線の位置と長さで表現したスペクトル線強度のみによって、スペクトル線に対応するブランチ番号の同定を行ったが、ここではさらに実験で得られるスペクトル形状そのものを予測できているか調べるために $\delta\nu_L$, $\delta\nu$ を考慮して回転スペクトルを計算する。

表3.4に実験で得られたスペクトルとレーザ線幅をパラメータとした計算結果を比較して示す。表3.4に示した計算ではレーザ掃引波長ステップ幅には実験系での設定値 $\delta\nu = 6.46 \times 10^{-4} \text{ nm} (0.17 \text{ cm}^{-1})$ を使用し、レーザ線幅としてはArF*エキシマレーザの公称線幅 0.5 cm^{-1} の他に 0.3 cm^{-1} , 0.1 cm^{-1} , 0.001 cm^{-1} である場合についても検討した。レーザ線幅が 0.5 cm^{-1} の場合には、それが(14, 3)バンドの前期解離線幅 0.18 cm^{-1} や、三重項構造の F_2 , F_3 の波長差約 $0.2 \sim 0.5 \text{ cm}^{-1}$ よりも大きいので、三重項構造は全く見えない。一方、実験結果を見ると各スペクトル線の先端は2つに割れている。三重項などの微細構造が現れているようにも見えるが、スペクトル線の根元は太く、スペクトルシミュレーション 0.5 cm^{-1} の場合によく類似している。したがってスペクトル線の先端の割れは3重項が顕在化したと言うよりも、むしろ強度の変動による割れと考えた方が良さそうである。

表 3. 4 線幅についての計算結果と実験結果の比較

	レーザ線幅	信号積分区間	スペクトル形状
実験 シミュレーション	0.5 cm ⁻¹ (公称値)	6.46×10 ⁻⁴ nm	
	0.5 cm ⁻¹	同上	
	0.3 cm ⁻¹	同上	
	0.1 cm ⁻¹	同上	
	0.01 cm ⁻¹	同上	

レーザ線幅を0.5 cm⁻¹から小さくしていくと、しだいに観測されるスペクトル線幅が狭くなっていく。しかし、三重項は観測されない。三重項を観測するには、現状の市販エキシマレーザでは望めないオーダであるが、レーザ線幅、レーザ掃引波長ステップ幅共に最低でも0.1 cm⁻¹以下とする必要がある。

回転温度は式(2.5)(2.6)で取扱った蛍光強度 $I_{J''J'}$ の回転エネルギー $E_{J''}$ に対する勾配として求める事が可能であり、両変数を各座標軸とする図はボルツマン・プロットと呼ばれている。図3.12に各実験条件に対して得た実験スペクトルを示す。図3.12には実験結果と対比して、レーザ線幅を $\delta\nu_L = 0.001\text{cm}^{-1}$ 、レーザ掃引波長ステップ幅を $\delta\nu = 0.17\text{cm}^{-1}$ とした場合の回転スペクトルシミュレーションの結果も示してある。

図3.12に示した各実験結果より、図3.5と同様の手順にて回転スペクトル線を同定し、各ブランチの蛍光強度を読み取り、その結果をボルツマン・プロットした結果を図3.13に示す。3重項の中で F_2 と F_3 の両方を含む回転スペクトル線については、 F_2 に対応する量子数 J'' 及びホーネル・ロンドン因子 $S_{J''J'}$ の値を用いてプロットした。

図3.13の測定点の勾配を最小二乗法によって求めて、回転温度を算出した。その最小二乗法による直線を図3.13に実線で、またそれに対応して求めた回転温度の結果を図3.14に○印で示す。

図中には等エントロピー流れの関係式

$$\frac{T}{T_0} = \left(1 + \frac{\gamma-1}{2} M^2\right)^{-1} \quad \dots\dots\dots (3.2)$$

にAshkenas & Sherman^[G5]による自由噴流中心軸上のマッハ数分布

$$M = A \left(\frac{x-x_0}{d_*} \right)^{\gamma-1} - \frac{1}{2} \left(\frac{\gamma+1}{\gamma-1} \right) / \left\{ A \left(\frac{x-x_0}{d_*} \right)^{\gamma-1} \right\} \quad \dots\dots\dots (3.3)$$

を考慮することにより得られる温度分布をも示した。本章の実験値はこの計算値とほぼ一致し、O₂-LIPF法が非平衡な場での温度計測に有効であることが結論できる。ただし、自由噴流下流域では若干の誤差がみられる。文献[G2, G3]によれば、回転温度の凍結は $x/d_* \sim 100$ 程度まで現われないので、図3.14の $x/d_* > 20$ で生じている実験値と式(3.2)との差異を回転温度の凍結の結果と見なすには早すぎるように思われる。

図3.14に現れるこの回転温度の擬似凍結現象に関して、さらに詳しく見てみる。ところで、図3.13のボルツマンプロットでは、回転スペクトル線強度分布の回転エネルギーに対する関係は直線ではなく、破線で示したように、下に凸の曲線であるように見える。これは低位の回転準位の回転緩和が早く、高位の回転準位の回転緩和が遅い性質を有することを意味しており、第2章で用いた回転準位占有数密度に対するボルツマン分布の仮定(式(2.6))が厳密には成立しないことを示唆する。回転準位の全測定値に対し最小二乗法を適用するのではなく

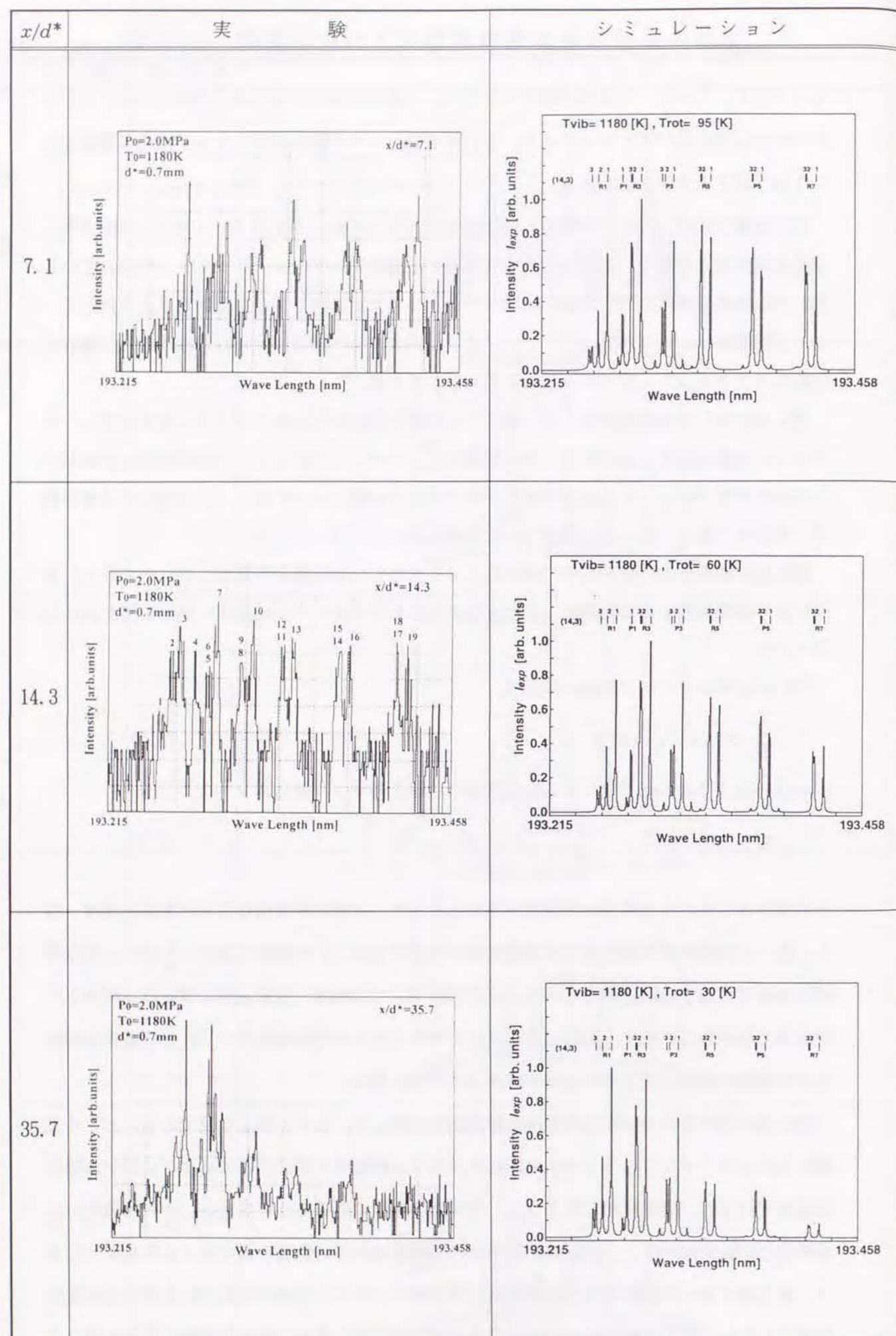


図3.12 自由噴流中心軸上で測定された O_2 -LIPFスペクトル

低位の回転準位あるいは高位の回転準位に対して別々に最小二乗法を適用して回転温度分布を求めた結果を、図3.14にエラーバーを用いて表示した。○印より上側は高位の回転準位により決め得る温度、また下側は低位の回転準位により決め得る温度の範囲を表している。高位の回転準位の回転緩和が遅くなると回転温度が高目に推算されることがわかる。このように回転準位がボルツマン分布していない可能性がある場合では、ボルツマン分布を用いた回転温度の定義が厳密性を失うことが指摘される。

高位の回転準位の回転緩和が遅い現象については、 NO_2 分子、 I_2 分子において類似現象が報告されている^[M19]。ただし、 O_2 分子のかかる現象については過去の研究例でも深く議論されておらず詳細は今後の検討を待ちたい。回転緩和の早い遅いが工業上どんな意味を持つかについても未知の分野であり、今後解明していく必要がある。

希薄な自由噴流中で得られた回転スペクトルから判断すると、回転エネルギー分布はボルツマン分布になっておらず、高位の回転レベルにもエネルギーが分配されており、したがって、従来一般的に行われるボルツマンプロットの手法で非平衡状態の回転温度を決定する手法には若干の不正確が伴うことがわかった。しかし、いずれにしても、回転の早期緩和の可能性も回転スペクトル線を個別に調べる O_2 -LIPF法によって初めて指摘できる事実であり、この意味で O_2 -LIPF法の有用性が示されたと言えるであろう。

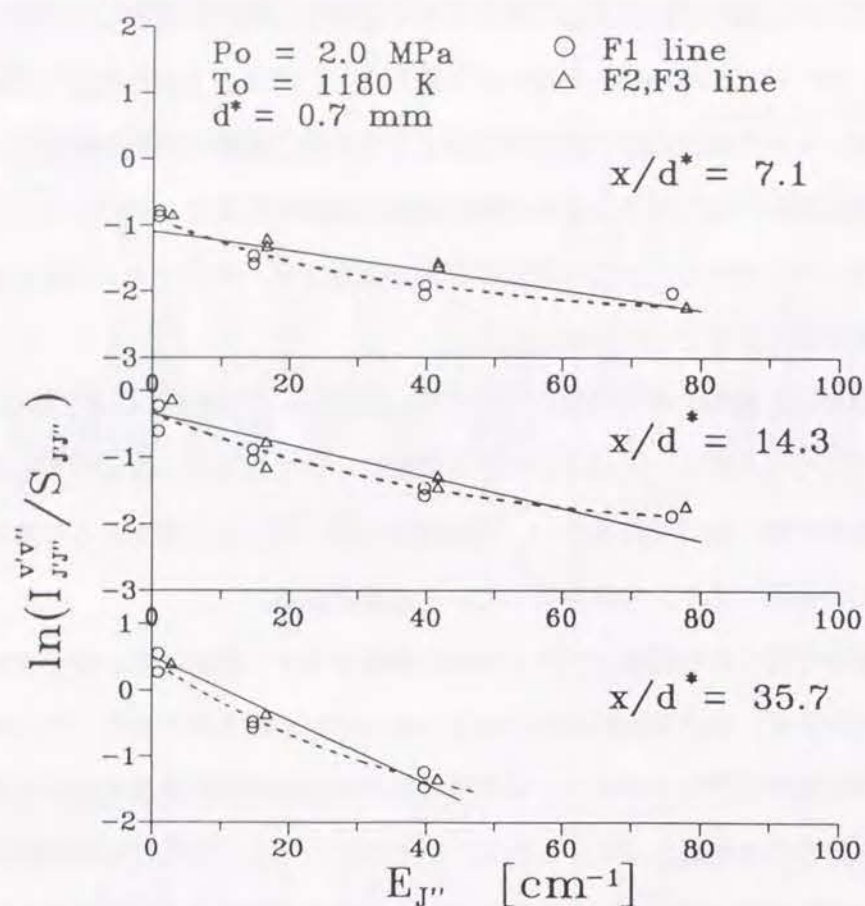


図3.13 自由噴流中心軸上 O_2 -LIPFスペクトル結果に基づいたボルツマン・プロット

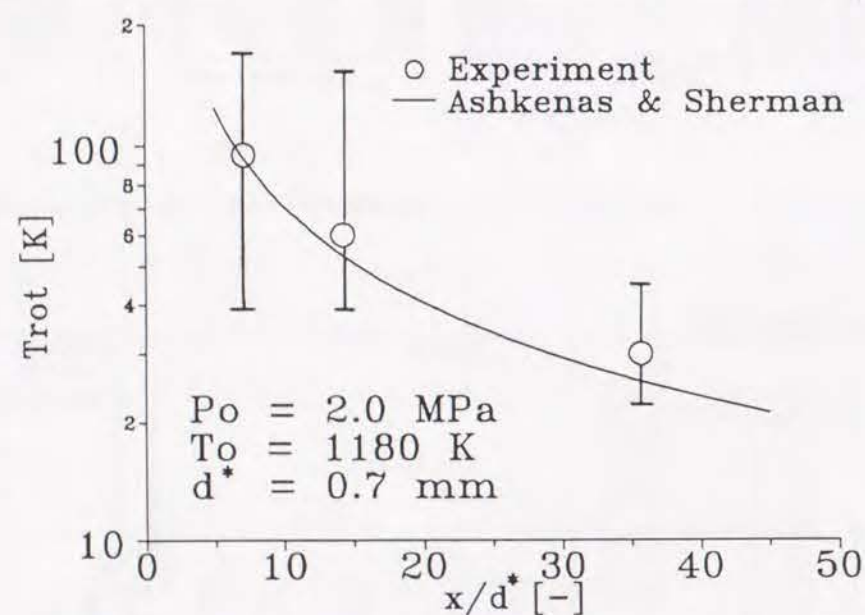


図3.14 自由噴流中心軸上の回転温度分布測定結果

3.4 希薄気体流中においた固体表面近傍の回転温度測定

本節ではスペクトルが(7, 1)(10, 2)(11, 2)等複雑なバンドが複合する形状を有する高温場に注目する。高温域ではバンド間の前期解離寿命が異なることに起因するスペクトル強度の変化が伴うのでスペクトル線幅の議論を折り込んだ回転スペクトル線の同定作業が必要となる。

本節では自由噴流中に円板状物体を設置し、その表面近傍の流れ場に注目することにする。固体表面近傍の希薄気体流れは本論文で対象とする蒸発面や蒸着面を初めとして、宇宙往還機の再突入時の機体表面の熱負荷問題や、半導体成膜、真空中における材料表面の脱ガス等とも関連する基本的な流れ系である。固体表面近傍における連続流(Continuum)から自由分子流(Free-Molecular)に至るまでの流れの変化を模式的に図3.15に示す^[G4]。高速気流が物体に衝突する際には、連続流域では物体まわりに衝撃波が生じ物体表面の情報は主流まで及ばない。中間流域(Transitional)では物体表面近傍は入射分子と反射分子が混在し、その場の特性量は主流の情報と表面の情報の両者に影響されるので複雑化する。分子領域では分子は互いに衝突しないので、主流の情報と表面の情報は混在するものの、相互作用はなく加算的であるから両者は分離可能である。

本論文で対象とする真空蒸着機では、蒸発面や蒸着面近傍の流れは中間流域に近い。そこで本節は中間流域における固体表面近傍の流れの測定例として、自由噴流中においた円板の表面近傍流れの回転温度の測定に O_2 -LIPFを適用した結果について述べる。固体表面近傍流れの回転温度を知ることは、表面の熱的適応係数を知るという工業的観点からも意義がある。

自由噴流中に円板を設置した場合の回転温度測定用テストセクションを図3.16に示す。図示した系は前掲と同様に真空風洞(V2G)内に設置されている。加熱銅製円板(直径 $D = 5$ mm, 円板表面温度 $T_w = 780$ K)を直径 $d^* = 0.7$ mmのノズルから噴出する極超音速自由噴流中の $x/d^* = 38.6$ の位置に設置する。ノズルのよどみ点圧力、温度はそれぞれ $P_o = 2.0$ MPa, $T_o = 1180$ Kである。図3.16に用いた x 及び x_s はそれぞれノズルからの距離、円板表面からの距離である。

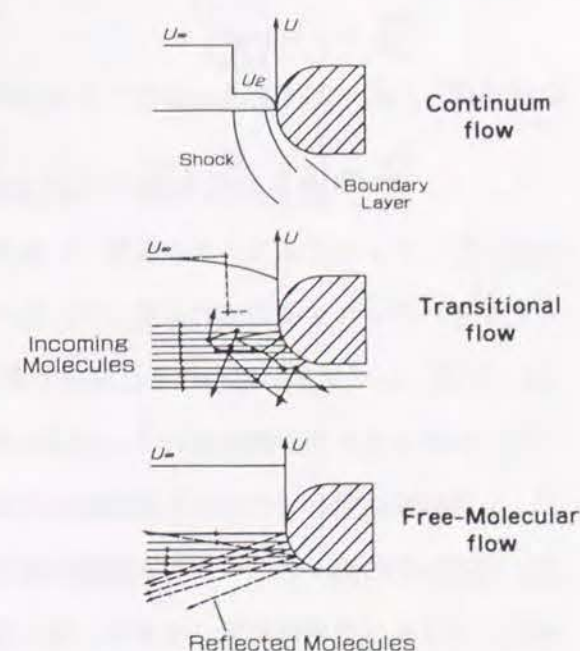


図3.15 表面近傍の流れ^[G4]

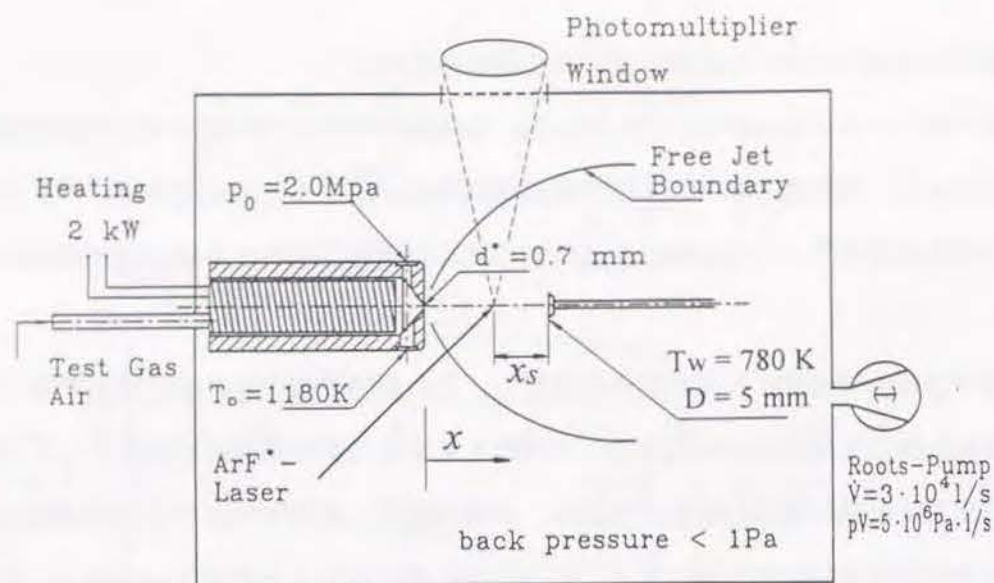


図3.16 自由噴流中に円板を設置した場合のテストセクション

文献[A5]の結果によれば、円板から反射される酸素分子の回転温度は円板の温度が $T_w = 780\text{ K}$ の場合、 200 K と 780 K の間にあるものと推定される。この温度域においては、表3.1で事前検討したように (14, 3) (10, 2) (11, 2) (7, 1) バンドが主要バンドであると予想されるので、これらのバンドを同定する必要がある。これらのバンドを個々に分離検討するためのスペクトルのキャリブレーションを、流れ場中にマッハディスクが出現する自由噴流（図3.17）^[G11]で行う。マッハディスク下流では回転温度はよどみ点温度にほぼ等しく、高い回転温度のスペクトルを示すと期待される。

このキャリブレーション実験では、 $T_0 = 1180\text{ K}$ 、 $P_0 = 2.0\text{ MPa}$ 、背圧 $P_\infty = 2.2\text{ kPa}$ なる条件を選んだ。この時マッハディスク位置はAshkenas & Shermanの式

$$\frac{x_M}{d^*} = 0.67 \left(\frac{P_0}{P_1} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.4)$$

に従えば、 $x/d^* = 20$ である。このことを垂直衝撃波前後における関係式

$$\frac{T_b}{T_a} = \left[1 + \frac{2\gamma}{\gamma+1} (M_a^2 - 1) \right] \left[1 + \frac{\gamma-1}{\gamma+1} (M_a^2 - 1) \right] M_a^{-2} \quad (3.5)$$

に用いて、マッハディスク後の温度 T_b を求めると、それは $T_b = 1147\text{ K}$ と求まる。したがってマッハディスク後の流れに対して、 O_2 -LIPFを適用すると回転スペクトルには (10, 2) (11, 2) (7, 1) バンドが現われると期待できる。

マッハディスクの下流位置 $x/d^* = 24.3$ において測定されたスペクトルを図3.18(a)、また、 $T_{rot} = 1147\text{ K}$ に対して予想される回転スペクトルシミュレーション結果を図3.18(b)に示す。図3.18(a)(b)中の個々のスペクトル近傍の番号は互に対応している。図3.18(b)では図の上に対応するブランチ番号が示してあり、強く現れているピーク1, 2, 3はそれぞれ (11, 2) バンドのR27, (10, 2) バンドのP15, R17と明確に同定できる。

スペクトル同定のためのキャリブレーション実験で得られた自由噴流中心軸上回転温度を、度分布を、式(3.2)及び式(3.3)に従う温度分布と合わせて図3.19に示す。マッハディスク後の温度は、 $850 \sim 1000\text{ K}$ と測定された。式(3.5)を用いて予想された $T_{rot} = 1147\text{ K}$ に比べると小さい値になっている。現象が実際そうなのか、その差異が測定誤差であるのかは判定し難いが、図3.20の高い回転温度領域における回転スペクトルシミュレーション結果から判断すると、 $T_{rot} \approx 1000\text{ K}$ 付近では、回転温度に対するスペクトルの変化が顕著ではないので、この温度領域では回転温度計測の誤差が大きいことは推察される。

上の O_2 -LIPFキャリブレーション実験では重要な (14, 3) (10, 2) (11, 2) (7, 1) バンドすべてが同定できることがわかった。そこで、以下では過去知見のない軸対称噴流中に置いた銅製円板の近傍流れの回転温度の測定を試みる。

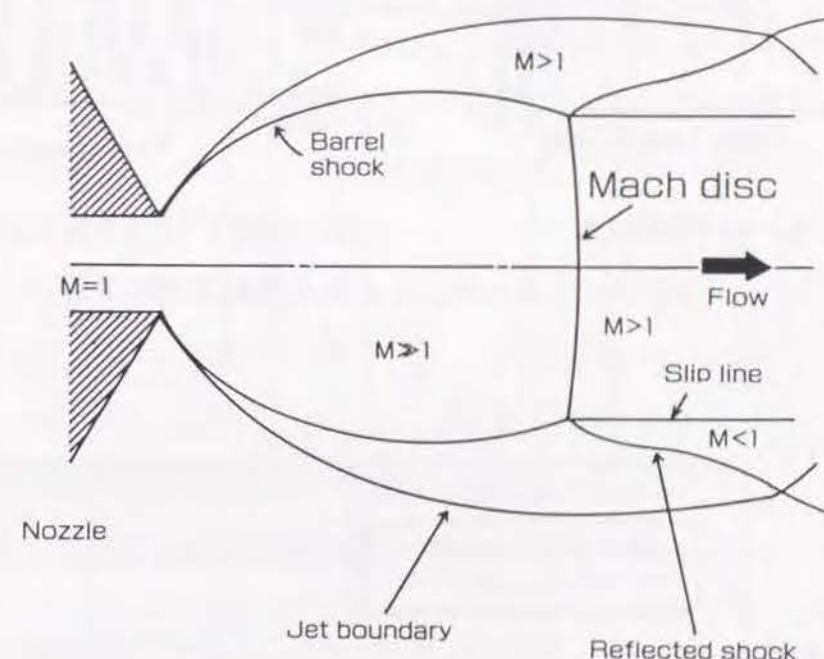


図3.17 マッハディスクが存在する場合の自由噴流 ^[G11]

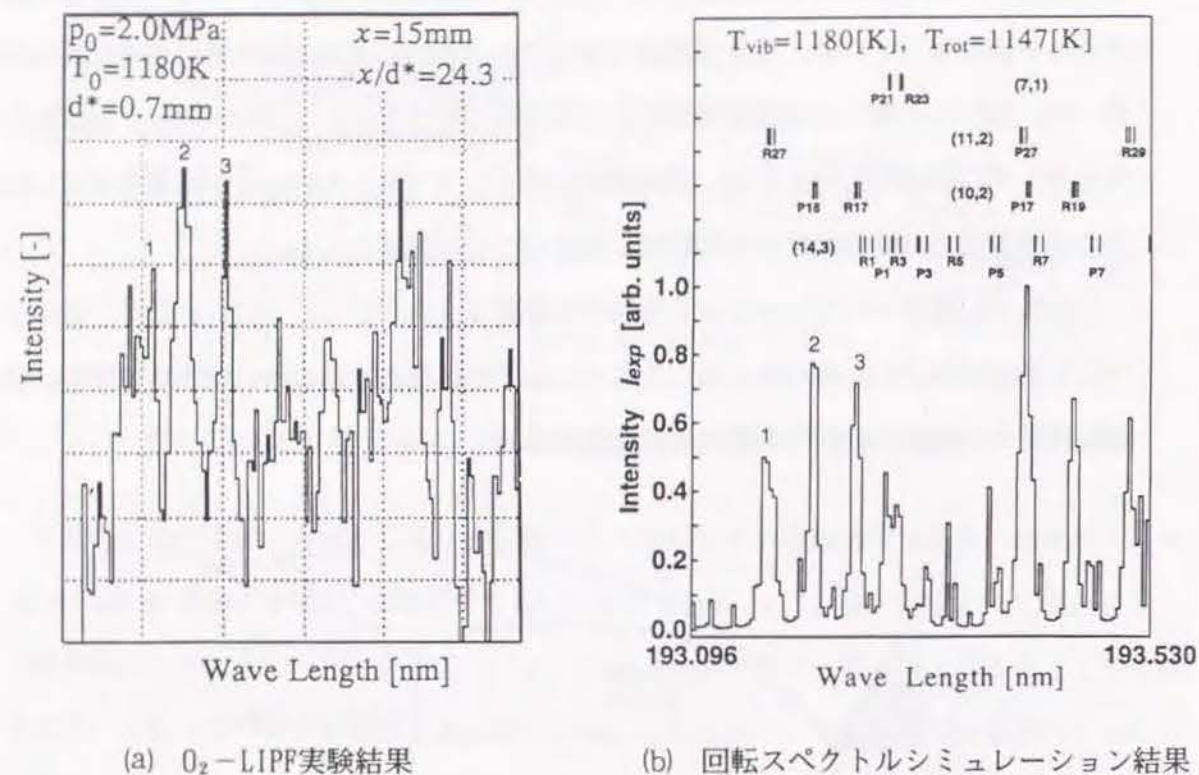


図3.18 マッハディスク後の回転スペクトル

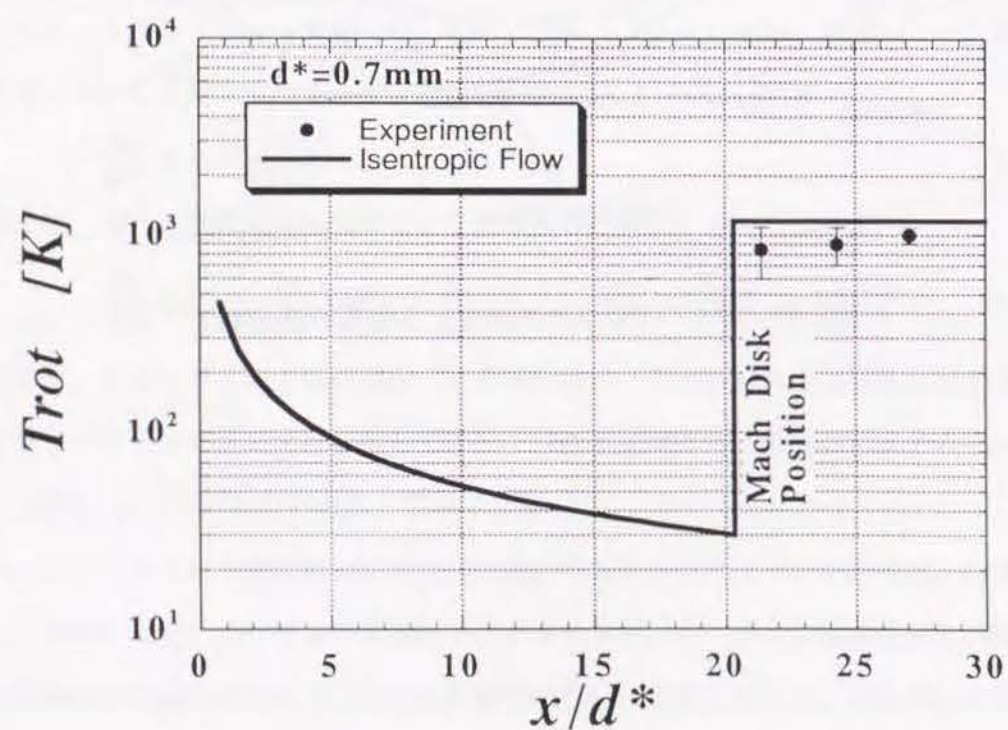
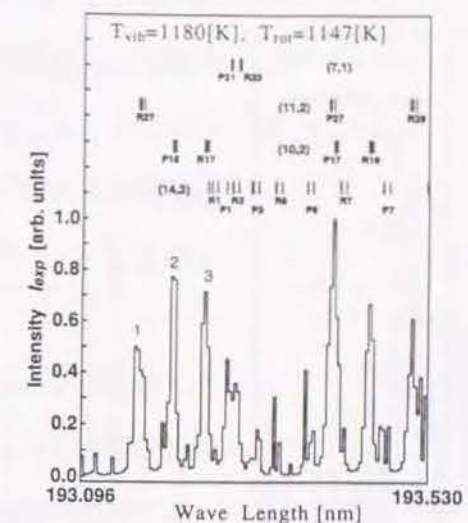
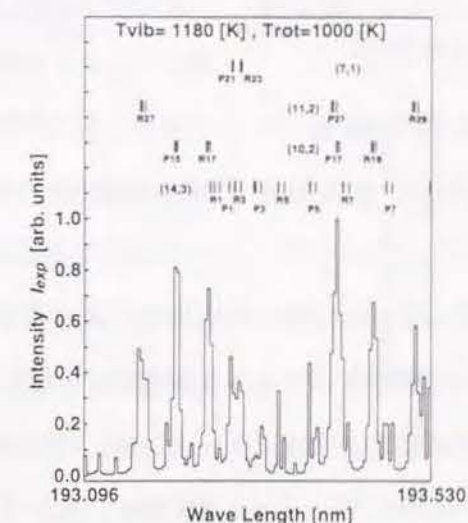


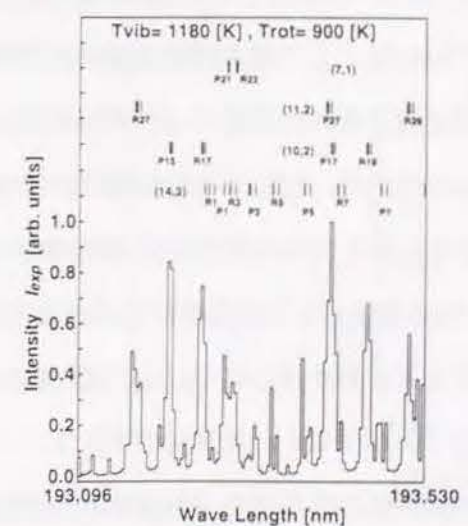
図3.19 マッハディスク後の回転温度分布



(a) $T_{vib} = 1180\text{K}$, $T_{rot} = 1147\text{K}$ の場合

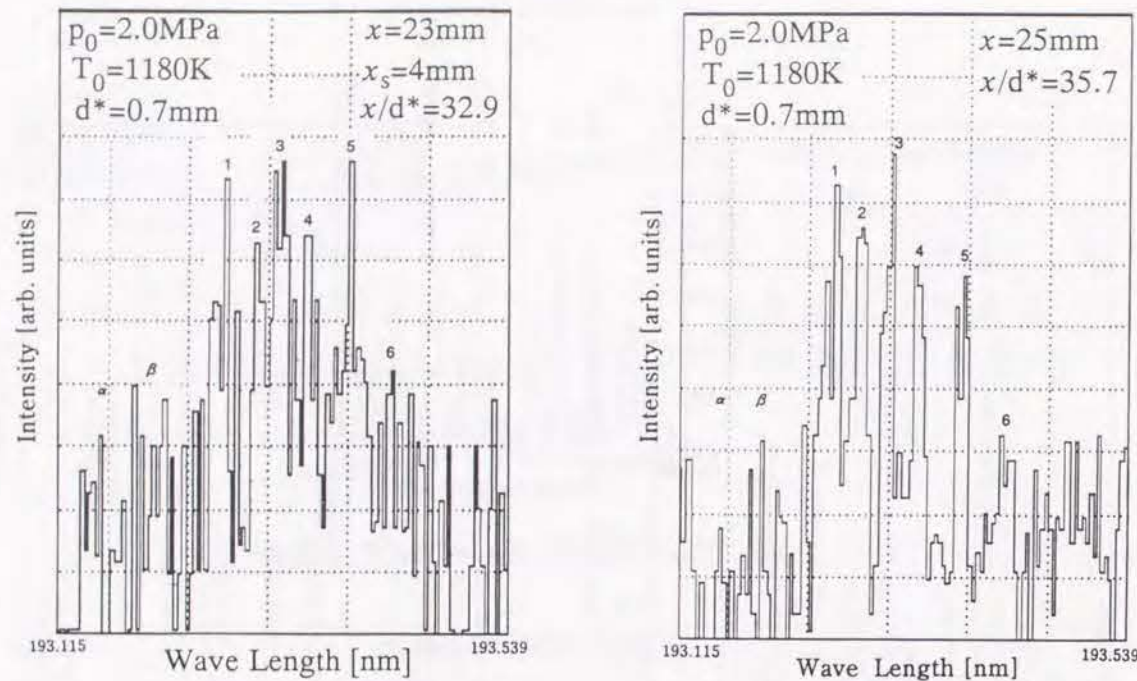


(b) $T_{vib} = 1180\text{K}$, $T_{rot} = 1000\text{K}$ の場合



(c) $T_{vib} = 1180\text{K}$, $T_{rot} = 900\text{K}$ の場合

図3.20 高回転温度域の回転スペクトルシミュレーション結果



(a) 銅製円板のある場合

(b) 銅製円板のない場合

図3.21 円板のある場合と無い場合のスペクトル比較

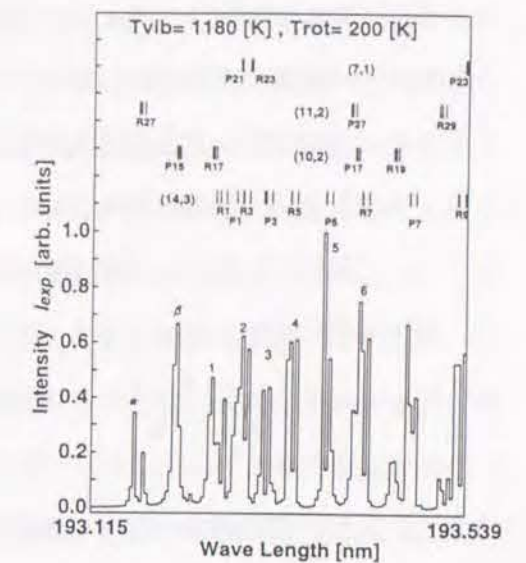
超音速自由噴流中の $x/d^* = 32.9$ の位置に高温銅製円板 (温度 $T_w = 780\text{K}$) を設置し、その近傍 $x_s = 4\text{mm}$ の位置において回転スペクトルを測定した。図3.21(a)に測定結果を示す。この位置における円板直径を代表長さとするクヌーセン数、 O_2 の平均自由行程 λ_{MFP} 、数密度 n_o 、図マッハ数 M はそれぞれ $Kn = 0.09$ 、 $\lambda_{MFP} = 0.4\text{mm}$ 、 $n_o = 9 \times 10^{15}\text{cm}^{-3}$ 、 $M = 14.5$ である。この実験条件では、3.3節の実験と同一のレーザ掃引波長ステップ ($\delta\nu = 6.46 \times 10^{-4}\text{nm}$) で実験を行うと激しいノイズによって蛍光スペクトルが得られなかったため、レーザ掃引波長ステップを $\delta\nu = 3.39 \times 10^{-3}\text{nm}$ に粗くして積算回数を増やして測定を行った。一方、銅製円板を設置しない場合の流れ場で測定された回転スペクトルを図3.21(b)に示す。この実験条件は、表3.2の実験No.3と同一条件であり、図3.12下段左図の様にレーザ掃引波長ステップを小さくしても実験は可能であるが、図3.21(a)と対比させる為にレーザ掃引波長ステップを図3.21(a)と同一 ($\delta\nu = 3.39 \times 10^{-3}\text{nm}$) に粗くして測定を行った。したがって、図3.21(b)では、図3.12下段左図のスペクトルのなまった形が得られている。図2.21(a)(b)の縦軸の相対強度に言及しておくとして図3.21(b)の方がノイズが少なく、約3倍の蛍光スペクトル強度であった。図3.21(a)と図3.21(b)の比較から、円板表面の O_2 反射分子の示すスペクトルと入射する O_2 分子のスペクトルを分離する。円板を設置しない流れ場中では現れないスペクトル線は円板からの O_2 反射分子の示すスペクトル線であると解釈される。図3.21(b)中では(11, 2)バンドのR27ブランチ及び(10, 2)バンドのP15ブランチ

(図3.21(a)で α , β の記号付) が図3.21(a)中のそれに比べて強くなっている。すなわち、円板表面近傍の O_2 の回転温度は自由噴流のそれに比べて、やや高くなっていると考えられる。

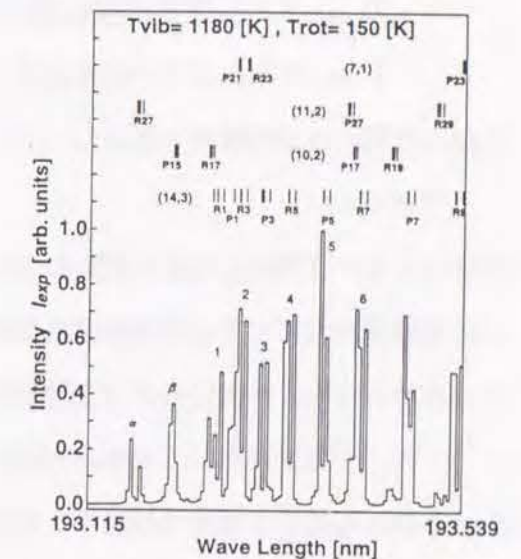
図3.21(a)における α , β の記号を付した回転スペクトル線強弱から回転温度を推算するために、図3.22の回転温度領域 $T_{rot} = 100\text{K} \sim 200\text{K}$ におけるスペクトルシミュレーション結果を参照する。図3.22中には、(14, 3) バンドに属する回転スペクトル線群(1, 2, 3, 4, 5, 6の記号を付した線)とペア状に現れる α , β を付した線を示しており、これら両者の強弱関係が回転温度推算の決め手になる。

$T_{rot} = 100\text{K}$ の場合(図3.22(a)) には、 α , β のスペクトル線はほとんど見えないが、 $T_{rot} = 200\text{K}$ になると、(14, 3) バンドの強度と同程度に際立って強くなることからわかる。入射する O_2 分子の温度は3.3節の検討結果(図3.14)より $T_{rot} \approx 30\text{K}$ であるとなっているので、その温度に対する回転スペクトルと図3.22で示されるスペクトルがほぼ等価に複合されることを考慮することにより、銅製円板のある場合の反射 O_2 分子の回転温度は大略 $T_{rot} = 100 \sim 200\text{K}$ であると推算される。

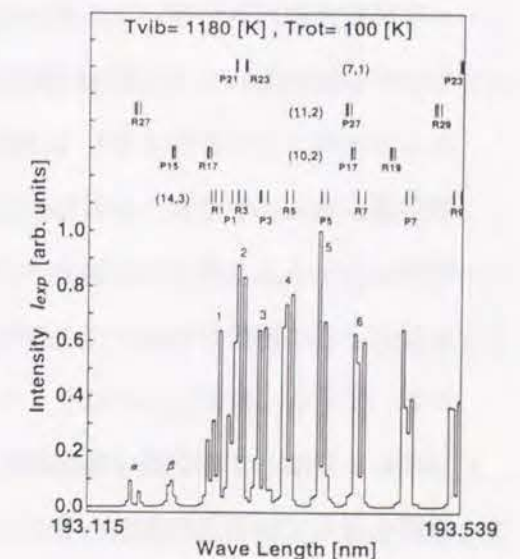
自由噴流軸に沿う回転温度測定結果を図3.23に示す。回転温度の算出には、(14, 3) バンドの三重項スペクトル各項についての



(a) $T_{rot} = 200\text{K}$ の場合



(b) $T_{rot} = 150\text{K}$ の場合



(c) $T_{rot} = 100\text{K}$ の場合

図3.22 $T_{rot} = 100\text{K} \sim 200\text{K}$ における回転スペクトルシミュレーション結果

ボルツマンプロットを用いた。高温銅製円板の前面の近傍領域では自由噴流単独の場合に比べてやや回転温度が高くなっている。これは反射分子の回転温度が入射分子のそれより高いことに由来する。図3.24に空気自由噴流の代わりにHeあるいはN₂自由噴流にNO分子をシーディングして得た実験結果を比較して示す。O₂分子の回転温度測定結果はNO分子のそれより低い。これは、O₂分子の回転運動に関する次式で定義される熱的適応係数がO₂の場合にNOのそれより低いことを示唆する。

$$\sigma_{rot} = \frac{T_{i,rot} - T_{r,rot}}{T_{i,rot} - T_w} \quad \dots (3.6)$$

ここで

σ_{rot} : 回転運動に関する熱的適応係数 [-]

$T_{i,rot}$: 入射O₂分子の回転温度 [K]

$T_{r,rot}$: 反射O₂分子の回転温度 [K]

T_w : 表面温度 [K]

である。

いま、式(3.6)により図3.24中の測定結果に対応するO₂の熱的適応係数を求めると $\sigma_{rot} = 0.15 \sim 0.2$ と計算され、一方、NO分子に対しては $\sigma_{rot} \approx 0.4$ であり、O₂分子に対する値が小さめであることがわかる。

本実験では円板表面により近い $x_s < 2$ mmの領域において、は銅製円板表面からの信号ノイズが強すぎてLIF信号を分離することができなかったため、回転スペクトルを得ることは出来なかった。ここに検討した $x_s < 2$ mmの位置においてすら、反射O₂分子はクヌーセン数から判断して平均的に数回の衝突履歴を有していると推察される。したがって、この位置で測定対象となったO₂分子はすでにある程度回転緩和を生

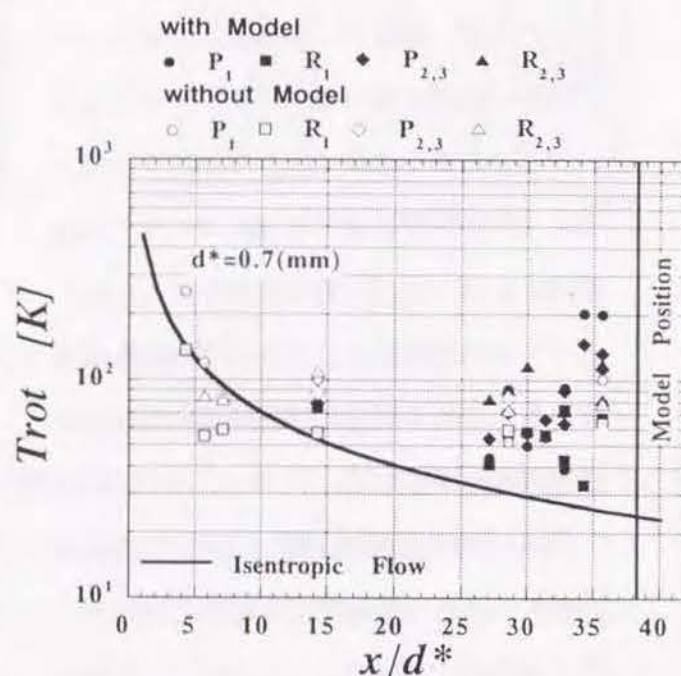


図3.23 円板のある場合と無い場合の回転温度分布

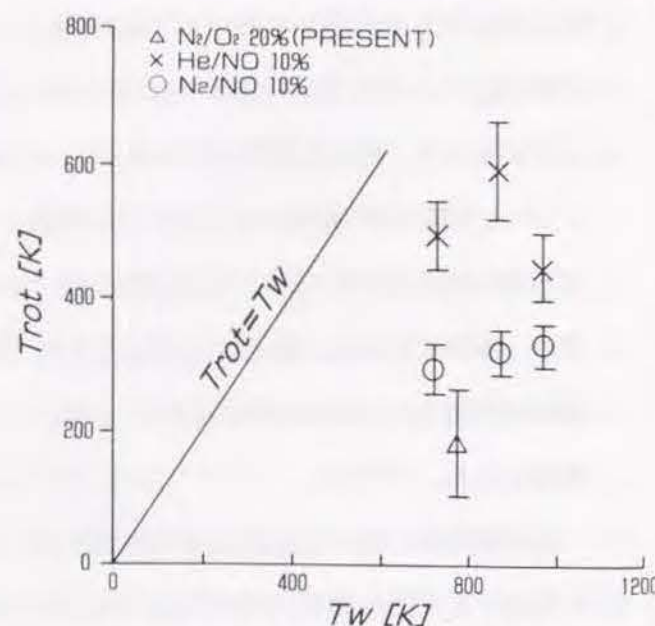


図3.24 円板からの反射分子の回転温度

じており、前記の計算方法では T_{rot} を低く、したがって σ_{rot} も低く見積りすぎているかも知れない。また、空気の自由噴流にさらされる高温銅表面が酸化膜におおわれることを回避したい本実験のような場合には、銅表面においてO₂分子と表面温度分布層の衝突のみならず、O₂分子と銅表面との酸化反応が進行しているので、HeやNOなどの分子と銅表面との衝突における熱的適応係数の結果との単純な比較を行うことはできない。本研究ではO₂分子と固体表面との衝突現象の詳細にまで立入ることは出来なかったが、かかる現象については、O₂-LIPF法のような入射分子と反射分子の温度状態を分離できる手法によって初めて検討が加えられることは示すことが出来たと思われる。中間流域におけるO₂分子の熱的適応係数については、過去の研究例でも深く議論されておらず、今後O₂-LIPF法の測定誤差の低減に向けてさらなる努力を続けていくことを要する。

3.5 結 言

本章においては、第2章において理論的に検討したO₂-LIPF法を、希薄な軸対称自由噴流の回転温度測定に適用し、次の結論を得た。

- (1) 前期解離線幅とレーザ線幅及びレーザ掃引波長ステップ幅に基づく理想スペクトル形状からのなまりを正確に予測して、O₂-LIPF実験で実際に得られるスペクトル形状を適切に解釈できる理論を確立した。その結果、前期解離線幅が狭い(14, 3)バンドはスペクトル形状がなまりやすく、実験上注意を要することが指摘された。
- (2) 振動・回転温度が非平衡な流れ場の例として、スペクトル形状が最もシンプルな(14, 3)バンドのみが支配的となる低回転温度域の軸対称超音速自由噴流を取り上げて回転温度を測定した。得られた温度分布は、等エントロピ流れの式にAshkenas & Shermanのマッハ数分布を用いて得られる温度分布とはほぼ一致した。さらに測定結果から、回転エネルギー分布はボルツマン分布とはやや異なることが指摘された。
- (3) 超音速自由噴流中のマッハディスク下流の高回転温度領域に対してO₂-LIPFを適用し、高温域で支配的となる(7, 1)(10, 2)(11, 2)バンドを明確に同定することが出来た。これにより、工業応用上問題となる温度領域の全域で、第2章で検討したO₂-LIPF理論が妥当性を有することが検証できた。
- (4) (14, 3)(7, 1)(10, 2)(11, 2)バンドが複合的に存在する流れ場として、マッハ数14.5、クヌーセン数0.09の中間流域の超音速噴流が温度780 Kの銅製円板に衝突する流れ場を選定し、回転温度を求めた。誤差の低減に向けて今後のさらなる努力が必要であるが、測定は可能であり、具体例として回転運動に関する熱的適応係数を吟味した。これにより、異

なった温度レベルにある分子が混在する複雑な現象に対しても O_2 -LIPF法が適用できる見通しを得た。

第 4 章

I_2 -LIFによる流速測定理論

4.1 緒 言

第2章及び第3章では酸素分子(O_2)をとり上げ、レーザ誘起蛍光法を主として希薄気体流れの「温度計測」に適用する側面から検討を行ってきた。本章及び次の第5章では話題を転じて、レーザ誘起蛍光法の希薄気体流れの「速度計測」への適用に視点を移し、よう素分子(I_2)を対象とするレーザ誘起蛍光法(I_2 -LIF)による速度計測に関して検討を行う。

速度計測ではスペクトルのドップラシフト量を計測するので、前期解離線幅が広く、かつ、レーザ線幅の広いエキシマレーザでしか励起できない O_2 分子はあまり速度計測に適した分子とは言えない。これに対して I_2 -LIFは、(1)極めて線幅の狭い I_2 分子の核スピンレベルの超微細構造スペクトルを用いることが出来るうえに、(2)極めて線幅の狭いリングダイレーザを励起レーザとして使用できること、の利点があり、速度計測に適していると考えられる。

よう素分子(I_2)は、蛍光を発しやすい分子として注目され、それをシーディング分子として用いるレーザ誘起蛍光法(I_2 -LIF: Laser-induced Fluorescence)はレーザ誘起蛍光法の研究初期段階から、ガス流れの速度、密度、温度の非接触測定手段として研究が進められて来た^[J2, J4, J10, J11, J12, J13]。これらの例では、分子の振動・回転運動に起因する振動・回転スペクトル線は1本のスペクトル線とみなされて、流速は回転スペクトル線の中心波長シフト量から、求められている^[J10, J11]。しかし、 I_2 は重い分子であるが故に、回転スペクトル線にはドップラ幅や衝突幅だけではなく、超微細構造幅が付随しており、したがって回転スペクトル線幅は全体的にブロードであり、中心波長シフトの計測には大きな測定誤差が伴いやすい。そこで、従来の測定例はないものの、本論文では新しい試みとして希薄気体流れの流速のより正確な測定手段を開発する目的から、回転スペクトル線幅よりも十分狭い極狭帯域化されたリングダイレーザを用いて、 I_2 の超微細構造を考慮した I_2 回転スペクトルの中心波長シフト量の測定を試みる。 I_2 の回転スペクトル線に含まれている超微細構造は分子を構成する原子核スピンに起因する。この超微細構造に注目する計測例としては、 I_2 をシーディングした超音速噴流に見られる不規則な蛍光ストリークの可視化^[J9, J11]や高分解能分光法による分光測定^[J12]などがあるが、それを速度測定に適用するための研究は未だ十分になされてはいない。しかし、回転スペクトル線の含む超微細構造を1本1本詳細に考慮したスペクトル形状の分析により、 I_2 -LIFの測定精度向上が期待できるので、それは分子レベルの流れ現象の詳細をより正確に把握できる手法となるものと期待できる。

本章では、シーディング分子として用いるよう素分子(I_2)の超微細構造スペクトルに関する分光学的研究^[12, 13, 14]に基づくスペクトル形状の理論計算について検討し、次の第5章ではリングダイレーザを用いて行った超音速自由噴流中心軸上の流速測定結果について検討を加える。

検討内容を具体的に述べると、その第一として I_2 -LIFにおいて用いるよう素分子の $B^3\Pi_{0_u}^+ \leftrightarrow X^1\Sigma_g^+$ 遷移バンドの一般的特徴を明らかにし、 I_2 -LIFを用いた速度測定においてなすべき留意事項を明らかにする。次に、 $B^3\Pi_{0_u}^+ \leftrightarrow X^1\Sigma_g^+$ バンド中の回転スペクトル線が含む核スピンの起因する超微細構造を一般的に計算する手法を検討する。最後に、気体の圧力、温度による超微細構造を含む回転スペクトル形状の変化を調べ、回転スペクトル線のドップラシフト量と速度の関係について行うべき正確な解釈を提示する。

4.2 I_2 -LIFの理論

4.2.1 速度測定の原理^[M2, J11]

流れ場中に流速 $\vec{u} = \{u_x, u_y, u_z\}$ にて移動している分子（本章ではよう素分子 I_2 ）を考える。場に進行方向ベクトル \vec{k} を有するレーザ光の波を入射すると、ドップラ効果により分子は周波数 ν のレーザ光を

$$\nu' = \nu + \vec{k} \cdot \vec{u} \quad (4.1)$$

として感じる。もし分子が静止流体中 ($|\vec{u}| = 0$) において ν_0 で共鳴するとすれば、レーザと分子の共鳴周波数 ν_a は、

$$\nu_a = \nu_0 - \vec{k} \cdot \vec{u} \quad (4.2)$$

となる。以上の結果より、共鳴周波数 ν_0 のわかっている回転スペクトル線に対し、レーザ光の入射方向 \vec{k} を決めてドップラシフト

$$\Delta\nu_{DS} = \nu_a - \nu_0 \quad (4.3)$$

を測定することにより、分子の \vec{k} 方向の速度を求めることが出来る。

次の第5章の実験では自由噴流の中心軸上流速の下流方向からレーザ光を入射する。したがって、ドップラシフト量は、光の速度 c を用いて

$$\Delta\nu_{DS} = \nu_a - \nu_0 = \frac{u_x}{c} \nu_0 \quad (4.4)$$

で表現される。本研究で用いるレーザ光に対応する I_2 の共鳴周波数 $\nu_0 = 5.159612 \times 10^{14}$ Hz (波長581.0367nm) を基にしたドップラシフト量と流速の関係を図4.2に示す。図4.2よりで約600m/sで1000MHzのドップラシフト量であることがわかる。これは前の第2章、第3章の O_2 -LIPFで用いるArF*エキシマレーザ光源の線幅 0.5 cm^{-1} ($\approx 15000 \text{ MHz}$) よりもかなり小さい量であり、このことから O_2 -LIPFでは流速測定が困難であること、したがって流速測定には、リングダイレーザのような線幅500kHzのレーザ光源が必要であることがわかる。

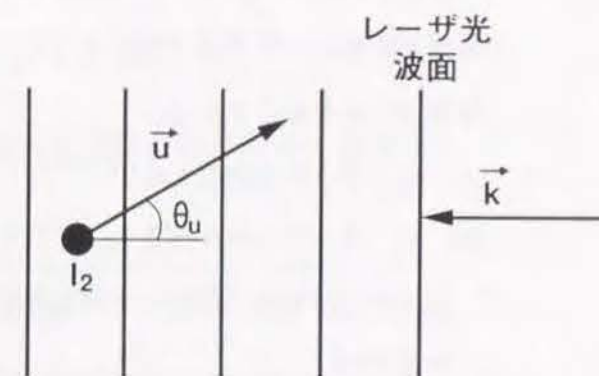


図4.1 流れ場中の I_2 分子とレーザ光波面の干渉

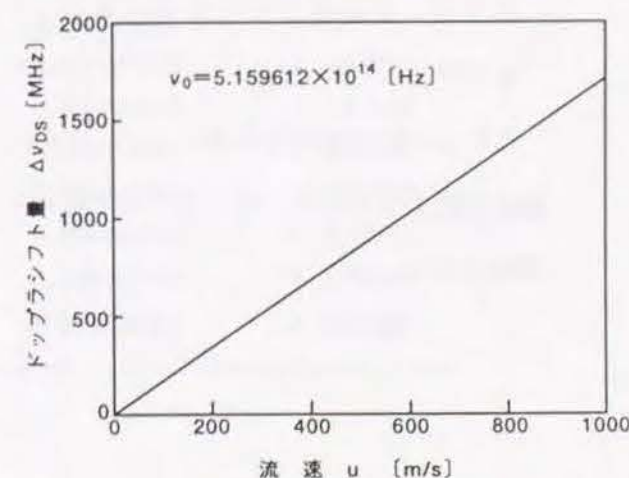


図4.2 流速とドップラシフト量の関係

4.2.2 I_2 の $B^3\Pi_{0u}^+ \leftrightarrow X^1\Sigma_g^+$ バンドの回転スペクトル・シミュレーション

4.2.1 節において述べたように、流れ場の流速は、速度場に対する入射レーザ光とトレース分子である I_2 分子の回転スペクトル共鳴周波数のドップラシフト量より求めることが出来る。ドップラシフト量はスペクトル中心周波数のシフト量によって定義される。 I_2 分子の場合、超微細構造による線幅を有しているために^[110]、スペクトル形状が単一のガウス関数では表示出来ないで、スペクトル中心周波数とはスペクトル形状中のどの位置であるかを厳密に定義しておくことが必要である。次節において超微細構造を含めた厳密なスペクトル形状を理論的に導くに先立って、本節では回転スペクトル・シミュレーションにより

- (1) $B^3\Pi_{0u}^+ \leftrightarrow X^1\Sigma_g^+$ バンド全体の特徴を知り、流速測定可能なレーザ波長域について考察を加える
- (2) I_2 -LIFによる共鳴回転スペクトルのブランチ名を同定し、超微細構造を計算するための回転量子数を特定することを試みる。

図4.3に I_2 のポテンシャル曲線を示す。 I_2 の回転スペクトルの中で最も良く用いられる蛍光の強いバンドは $B^3\Pi_{0u}^+ \leftrightarrow X^1\Sigma_g^+$ (以下B-Xバンドと言う) である。B-Xバンドの特徴は次のとおりである。

- (1) Qブランチは存在しない^[110]。
- (2) P, Rブランチが存在し、それぞれについて奇項、偶項いずれも存在する^[110]。
- (3) PブランチはP1からスタートし、RブランチはR0からスタートする^[118]。

これらの特徴を有するB-Xバンドの構造を図4.4に示す。B-Xバンドは一重項である。

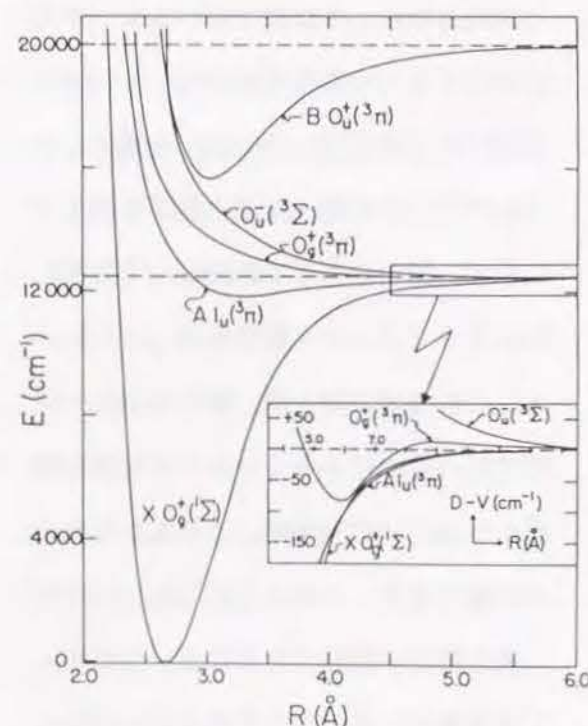


図4.3 I_2 分子のポテンシャル曲線^[115]

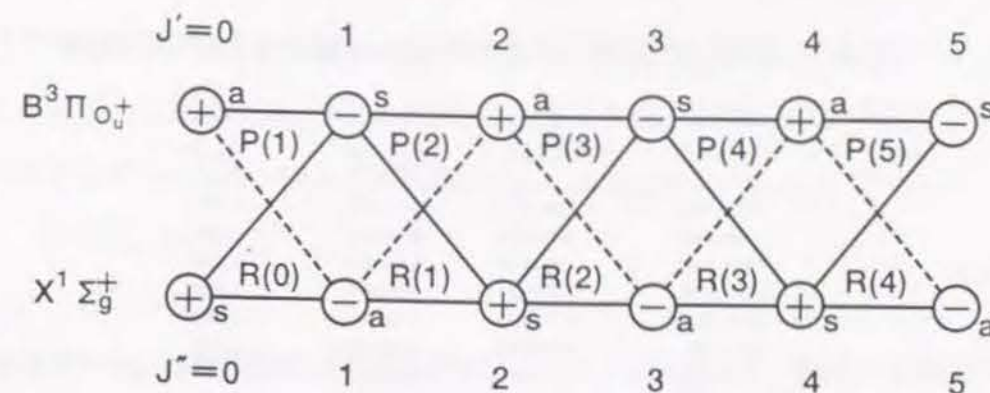


図4.4 B-Xバンドの構造

2原子分子の回転スペクトルシミュレーションは第2章と同様の取扱いで行う。

振動準位エネルギー $G(v)$ に関し、 $X^1\Sigma_g^+$ については文献[H1]、 $B^3\Pi_{0u}^+$ については文献[H1]に示される振動エネルギー準位の値を用いる。その値をまとめて表4.1、表4.2にそれぞれ示す。また、回転準位エネルギー $F(J)$ に関し、次式を用いて計算する。

$$F(J) = B_v J(J+1) - D_v J^2(J+1)^2 + H_v J^3(J+1)^3 \quad (4.5)$$

B_v, D_v, H_v の具体的な数値については文献^[11]にしたがって表4.1及び表4.2に掲載した値を用いる。

表4.1 $X^1\Sigma_g^+$ の振動エネルギー準位及び回転準位の分子定数^[11]

v''	$E_{ov''}$ (cm ⁻¹)	$B_{v''}$ (cm ⁻¹)	$10^9 \times D_{v''}$ (cm ⁻¹)
0	0	0.037311571	4.5773338
1	213.3006	0.037197081	4.6028129
2	425.3733	0.037082021	4.6311452
3	636.2102	0.036966025	4.6445633
4	845.8034	0.036849704	4.6747097
5	1054.1457	0.036732571	4.7058148
6	1261.2279	0.036614776	4.7363730
7	1467.04114	0.036496162	4.7662557
8	1671.5786	0.036376769	4.7970460
9	1874.8283	0.036256529	4.8294091

表4.2 $B^3\Pi_{ou}^+$ の振動エネルギー準位及び回転準位の分子定数^[H1]

v'	$\sigma_{ov}, (\text{cm}^{-1})$	$10^2 x B_v', (\text{cm}^{-1})$	$10^8 x D_v', (\text{cm}^{-1})$	$10^{14} x H_v', (\text{cm}^{-1})$
1	15848.7476	2.8773913	0.6335021	- 0.2884
2	15971.3668	2.8619756	0.6479061	- 0.2446
3	16092.4368	2.8462991	0.6614539	- 0.2482
4	16211.9334	2.8303558	0.6743953	- 0.2952
5	16329.8365	2.8141348	0.6883674	- 0.3201
6	16446.1265	2.7976259	0.7025975	- 0.3658
7	16560.7843	2.7808307	0.7174997	- 0.4337
8	16673.7066	2.7637777	0.7329957	- 0.2693
9	16785.1140	2.7463287	0.7531339	- 0.4547
10	16894.7443	2.7285085	0.7729565	- 0.4491
11	17002.6565	2.7104914	0.7895742	- 0.6369
12	17108.8275	2.6920279	0.8062299	- 0.8579
13	17213.2364	2.6733027	0.8306592	- 0.5422
14	17315.8600	2.6540804	0.8563920	- 0.8006
15	17416.6768	2.6345073	0.8821992	- 0.8345
16	17515.6645	2.6145169	0.9091475	- 0.8477
17	17612.7997	2.5940917	0.9340232	- 1.0517
18	17708.0619	2.5732357	0.9623762	- 1.1821
19	17801.4283	2.5519456	0.9940724	- 1.2885
20	17892.8777	2.5301959	1.0298997	- 1.2951
21	17982.3892	2.5079402	1.0637903	- 1.4757
22	18069.9423	2.4851807	1.0997442	- 1.6424
23	18155.5174	2.4619286	1.1389726	- 1.8106
24	18239.0953	2.4381466	1.1803433	- 2.0038
25	18320.6579	2.4138215	1.2243490	- 2.2031
26	18400.1087	2.3889522	1.2713989	- 2.4057
27	18477.6718	2.3634965	1.3192903	- 2.6854
28	18553.0929	2.3374820	1.3711216	- 2.9696
29	18626.4308	2.3108798	1.4262925	- 3.2887
30	18697.6996	2.2836890	1.4865103	- 3.5557
31	18766.8672	2.2557445	1.5355186	- 0.42412
32	18833.9309	2.2274924	1.6174051	- 0.41267
33	18898.8899	2.1984005	1.6774918	- 0.49287
34	18961.7422	2.1687831	1.7535683	- 0.52878
35	19022.4879	2.1385023	1.8283588	- 0.58823
36	19081.1306	2.1075769	1.9028476	- 0.67257
37	19137.6777	2.0761056	1.9921597	- 0.7231
38	19192.1382	2.0439748	2.0780748	- 0.80951
39	19244.5247	2.0112771	2.1751283	- 0.87680
40	19294.8524	1.9779293	2.2681896	- 0.99053
41	19343.1405	1.9441079	2.3835023	- 1.04402
42	19389.4099	1.9096043	2.4857190	- 1.18789
43	19433.6851	1.8741319	2.5538711	- 1.46122
44	19475.9912	1.8387999	2.6907424	- 1.58054
45	19516.3611	1.8002895	2.8468907	- 1.62789
46	19554.8256	1.7663019	2.9869330	- 1.78339
47	19591.4197	1.7291363	3.1239311	- 2.00202
48	19626.1797	1.6915023	3.2686776	- 2.28222
49	19659.1449	1.6534103	3.4333592	- 2.50632
50	19690.3546	1.6148747	3.6115706	- 2.78861
51	19719.8506	1.5756474	3.7506198	- 3.36943
52	19747.6750	1.5362813	3.9934358	- 3.43854
53	19773.8703	1.4962899	4.1878601	- 4.04905
54	19798.4824	1.4557470	4.3919239	- 4.65555
55	19821.5542	1.4149379	4.6611350	- 5.05647
56	19843.1311	1.3734652	4.9008455	- 5.89927
57	19863.2585	1.3317148	5.2082764	- 6.60287
58	19881.9834	1.2892046	5.4377336	- 8.19568
59	19899.3523	1.2464889	5.8114065	- 8.87653
60	19915.4127	1.2031186	6.1303268	- 10.72266
61	19930.2139	1.1595435	6.5619420	- 12.10565
62	19943.8081	1.1151630	6.9177555	- 14.81389

回転準位間の遷移確率を示すヘーネル・ロンドン因子は、文献[M5]に示されている表4.3の式に従うと考える。なお、B-Xバンドでは $X^1\Sigma_g^+$ に対しては $\Lambda'' = 0$ 、 $B^3\Pi_{ou}^+$ に対しては $\Lambda' = 0$ だから、 $\Delta\Lambda = \Lambda' - \Lambda'' = 0$ である。したがって、Rブランチ、Pブランチに対してヘーネル・ロンドン因子は、

$$\left. \begin{aligned} S_{J',J''}^R &= J'' + 1 \\ S_{J',J''}^P &= J'' \end{aligned} \right\} \quad (4.6)$$

で表現される。振動準位間の遷移確率を示すフランク・コンドン因子は文献[M2]に示されている表4.4の値を用いた。表4.4の値の妥当性についてはフランク・コンドン因子の2原子分子に対する一般的計算法(Appendix 1)を用いて確認した。

表4.3 ヘーネル・ロンドン因子の式^[M5]

$\Delta\Lambda$	ヘーネル・ロンドン因子
+1	$S_J^R = \frac{(J'' + 2 + \Lambda'')(J'' + 1 + \Lambda'')}{4(J'' + 1)} = \frac{(J' + \Lambda')(J' - 1 + \Lambda')}{4J'}$ $S_J^Q = \frac{(J'' + 1 + \Lambda'')(J'' - \Lambda'')(2J'' + 1)}{4J''(J'' + 1)} = \frac{(J' + \Lambda')(J' + 1 - \Lambda')(2J' + 1)}{4J'(J' + 1)}$ $S_J^P = \frac{(J'' - 1 - \Lambda'')(J'' - \Lambda'')}{4J''} = \frac{(J' + 1 - \Lambda')(J' + 2 - \Lambda')}{4(J' + 1)},$
0	$S_J^R = \frac{(J'' + 1 + \Lambda'')(J'' + 1 - \Lambda'')}{J'' + 1} = \frac{(J' + \Lambda')(J' - \Lambda')}{J'}$ $S_J^Q = \frac{(2J'' + 1)\Lambda''^2}{J''(J'' + 1)} = \frac{(2J' + 1)\Lambda'^2}{J'(J' + 1)}$ $S_J^P = \frac{(J'' + \Lambda'')(J'' - \Lambda'')}{J''} = \frac{(J' + 1 + \Lambda')(J' + 1 - \Lambda')}{J' + 1},$
-1	$S_J^R = \frac{(J'' + 2 - \Lambda'')(J'' + 1 - \Lambda'')}{4(J'' + 1)} = \frac{(J' - \Lambda')(J' - 1 - \Lambda')}{4J'}$ $S_J^Q = \frac{(J'' + 1 - \Lambda'')(J'' + \Lambda'')(2J'' + 1)}{4J''(J'' + 1)} = \frac{(J' - \Lambda')(J' + 1 + \Lambda')(2J' + 1)}{4J'(J' + 1)}$ $S_J^P = \frac{(J'' - 1 + \Lambda'')(J'' + \Lambda'')}{4J''} = \frac{(J' + 1 + \Lambda')(J' + 2 + \Lambda')}{4(J' + 1)}$

表4.4 B-Xバンドのフランク・コンドン因子

v'	0	1	2	3	4	5
28	1.158-2	1.218-2	5.613-3	1.323-2	2.828-4	1.410-2
29	2.691-7	2.700-3	2.111-2	2.118-2	2.715-6	2.718-6
30	2.198-2	2.699-3	2.054-3	1.252-2	1.005-3	1.322-2
31	2.685	2.699-3	2.707-1	2.715-8	2.728-1	2.735-0
32	1.204-2	2.134-3	1.010-2	5.432-3	3.601-3	1.124-2
33	2.685	2.699-3	2.707-1	2.715-8	2.728-1	2.735-0
34	1.178-2	2.621-3	1.211-2	6.592-3	5.876-3	2.701-3
35	2.685	2.699-3	2.707-1	2.715-8	2.728-1	2.735-0
36	1.225-2	2.247-3	1.355-2	4.494-3	3.882-3	6.035-3
37	2.676	2.685	2.694	2.703	2.711	2.719
38	1.047-2	1.047-2	1.047-2	1.047-2	1.047-2	1.047-2
39	2.676	2.685	2.694	2.703	2.711	2.719
40	2.676	2.685	2.694	2.703	2.711	2.719
41	2.676	2.685	2.694	2.703	2.711	2.719
42	2.676	2.685	2.694	2.703	2.711	2.719
43	2.676	2.685	2.694	2.703	2.711	2.719
44	2.676	2.685	2.694	2.703	2.711	2.719
45	2.676	2.685	2.694	2.703	2.711	2.719
46	2.676	2.685	2.694	2.703	2.711	2.719
47	2.676	2.685	2.694	2.703	2.711	2.719
48	2.676	2.685	2.694	2.703	2.711	2.719
49	2.676	2.685	2.694	2.703	2.711	2.719
50	2.676	2.685	2.694	2.703	2.711	2.719
51	2.676	2.685	2.694	2.703	2.711	2.719
52	2.676	2.685	2.694	2.703	2.711	2.719
53	2.676	2.685	2.694	2.703	2.711	2.719
54	2.676	2.685	2.694	2.703	2.711	2.719
55	2.676	2.685	2.694	2.703	2.711	2.719
56	2.676	2.685	2.694	2.703	2.711	2.719

v'	0	1	2	3	4	5
1	1.429-4	3.409-8	4.441-7	3.598-6	2.131-5	9.885-5
2	2.826-8	2.830-6	2.840-5	2.841-4	2.842-3	2.843-2
3	2.826-8	2.830-6	2.840-5	2.841-4	2.842-3	2.843-2
4	2.826-8	2.830-6	2.840-5	2.841-4	2.842-3	2.843-2
5	2.826-8	2.830-6	2.840-5	2.841-4	2.842-3	2.843-2
6	2.826-8	2.830-6	2.840-5	2.841-4	2.842-3	2.843-2
7	2.826-8	2.830-6	2.840-5	2.841-4	2.842-3	2.843-2
8	2.826-8	2.830-6	2.840-5	2.841-4	2.842-3	2.843-2
9	2.826-8	2.830-6	2.840-5	2.841-4	2.842-3	2.843-2
10	2.826-8	2.830-6	2.840-5	2.841-4	2.842-3	2.843-2
11	2.826-8	2.830-6	2.840-5	2.841-4	2.842-3	2.843-2
12	2.826-8	2.830-6	2.840-5	2.841-4	2.842-3	2.843-2
13	2.826-8	2.830-6	2.840-5	2.841-4	2.842-3	2.843-2
14	2.826-8	2.830-6	2.840-5	2.841-4	2.842-3	2.843-2
15	2.826-8	2.830-6	2.840-5	2.841-4	2.842-3	2.843-2
16	2.826-8	2.830-6	2.840-5	2.841-4	2.842-3	2.843-2
17	2.826-8	2.830-6	2.840-5	2.841-4	2.842-3	2.843-2
18	2.826-8	2.830-6	2.840-5	2.841-4	2.842-3	2.843-2
19	2.826-8	2.830-6	2.840-5	2.841-4	2.842-3	2.843-2
20	2.826-8	2.830-6	2.840-5	2.841-4	2.842-3	2.843-2
21	2.826-8	2.830-6	2.840-5	2.841-4	2.842-3	2.843-2
22	2.826-8	2.830-6	2.840-5	2.841-4	2.842-3	2.843-2
23	2.826-8	2.830-6	2.840-5	2.841-4	2.842-3	2.843-2
24	2.826-8	2.830-6	2.840-5	2.841-4	2.842-3	2.843-2
25	2.826-8	2.830-6	2.840-5	2.841-4	2.842-3	2.843-2
26	2.826-8	2.830-6	2.840-5	2.841-4	2.842-3	2.843-2
27	2.826-8	2.830-6	2.840-5	2.841-4	2.842-3	2.843-2

4.2.3 超微細構造スペクトル・シミュレーション

前節において、回転スペクトル・シミュレーション手法について述べた。 I_2 -LIFにより速度を測定するためには、ある特定の回転スペクトルに着目して、そのスペクトル線中心がどこかを正確に定めることが必要であり、その回転スペクトル線が含む核スピンの起因する超微細構造を理解しておくことが必要である。

回転スペクトル線は室温域ではドップラ型に類似したスペクトル形状を持っているが、低温域では超微細構造が現われる^[11, 12]。回転スペクトル線の超微細構造は、

(a) 原子核の四極子モーメント (球対称性からのずれ)

(b) 原子核の磁気モーメント

に起因し、特に I_2 分子の場合には(a)の四極子モーメントが支配的であることが知られている^[14]。そこで本論文では四極子モーメントのみに着目して超微細構造を解析する。

I_2 分子の場合には、奇数番ブランチは21本、偶数番ブランチは15本の超微細構造を持つ。

この分裂は、核スピン $\frac{5}{2}$ を持つよう素原子核2個から成るよう素分子の持つ核スピン量子数 $I = \frac{5}{2} + \frac{5}{2} = 5$ のとりうる縮退の総和から算出できる^[15]。例えば奇数ブランチの場合、 $\sum_{I=1,3,5} (2I+1) = 21$ 本と計算出来る。

四極子モーメントの効果による分裂位置すなわち振動数は、36 (=15+21) の次元を持つ図4.5に示される36×36のハミルトニアン行列の固有値として計算する。核スピン量子数5を持つ2原子分子のハミルトニアン行列の成分は表4.5及び表4.6^[16]に示されており、核スピン量子数Iが奇数の成分のサブ行列から奇数ブランチに対応する21個の固有値が、また、偶数の成分のそれから偶数ブランチに対応する15個の固有値が求まる。固有値

と実際の振動数との対応は定数 ΔeQq

を用い、

$$E_{NEQ} = \lambda \cdot \Delta eQq \quad \dots\dots (4.7)$$

によって表現される。ただし ΔeQq

= -1936.9MHz^[11]とした。

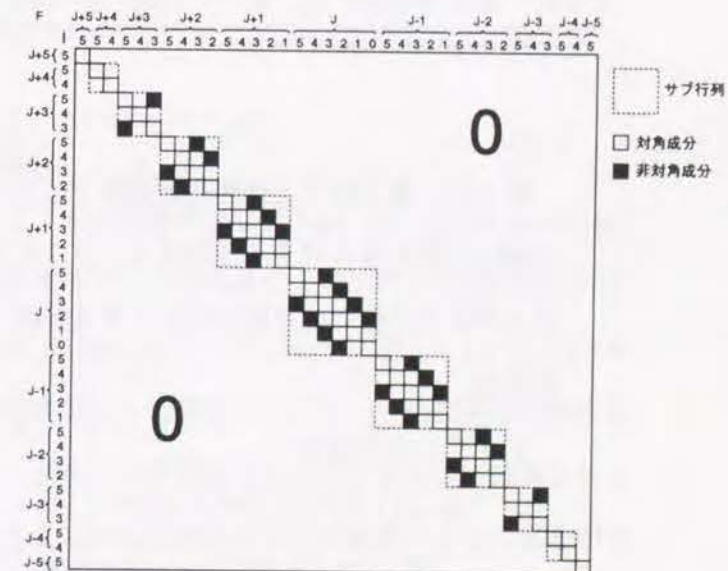


図4.5 ハミルトニアン行列の構造

表4.5 ハミルトニアン行列の対角成分^[16]

TABLE I. The diagonal elements of the first-order Hamiltonian matrix for two spins of $\frac{1}{2}$.							
F	$J =$	5	4	3	2	1	0
$J+5$		$0.5J(2J-1)$					
$J+4$		$1/10(2J-15)(2J-1)$	$0.2J(2J-1)$				
$J+3$		$-1/30(2J+125J-153)$	$1/20(J-12)(2J-1)$	$-0.0167J(2J-1)$			
$J+2$		$-1/5(J-2)(2J+23)$	$-1/140(16J+202J-273)$	$1/20(2J-1)$	$-0.1428J(2J-1)$		
$J+1$		$-1/10(6J+25J-126)$	$-1/140(34J+145J-459)$	$1/100(2J+9J-15)$	$1/14(J+6)(2J-1)$	$-0.16000J(2J-1)$	
J		$-1/6(4J+4J-87)$	$-1/14(4J+4J-57)$	$1/150(4J+4J-33)$	$1/14(2J-3)(2J+5)$	$4/25(2J+3)(2J-1)$	0
$J-1$		$-1/10(6J-13J-145)$	$-1/140(34J-77J-570)$	$1/100(2J-5J-22)$	$1/14(2J+3)(J-5)$	$-4/25(2J+3)(J+1)$	
$J-2$		$-1/5(J+3)(2J-21)$	$-1/140(16J-170J-459)$	$-1/20(2J+3)$	$-1/7(2J+3)(J+1)$		
$J-3$		$-1/30(2J-121J-276)$	$1/20(J+13)(2J+3)$	$-1/60(2J+3)(J+1)$			
$J-4$		$1/10(2J+17)(2J+3)$	$1/5(2J+3)(J+1)$				
$J-5$		$1/2(2J+3)(J+1)$					

* The expressions given here must be multiplied by $\kappa Q(\partial^2 V/\partial r^2)_{r_0}[J(J+1)]^{-1/2}$.表4.6 ハミルトニアン行列の非対角成分^[16]

TABLE II. The off-diagonal elements of the first-order Hamiltonian matrix for two spins of $\frac{1}{2}$.

F	$J =$	3, 5	2, 4	1, 3	0, 2
$J+3$		$\frac{1}{30} \left[\frac{5(2J+9)(J+4)}{J(2J-1)} \right]^{\frac{1}{2}}$			
$J+2$		$\frac{1}{20J} \left[\frac{5(2J+7)(J-1)(J+4)}{2J-1} \right]^{\frac{1}{2}}$	$\frac{9}{140} \left[\frac{5(J+3)(2J+7)}{J(2J-1)} \right]^{\frac{1}{2}}$		
$J+1$		$\frac{[2/7(J+3)(J-1)(2J-3)(2J+7)]^{\frac{1}{2}}}{4J(2J-1)}$	$\frac{9}{28J} \left[\frac{2(2J+5)(J-1)(J+3)}{5(2J-1)} \right]^{\frac{1}{2}}$	$\frac{9}{25} \left[\frac{3(J+2)(2J+5)}{7J(2J-1)} \right]^{\frac{1}{2}}$	
J		$\frac{[5/7(2J-3)(2J+5)(J-2)(J+3)]^{\frac{1}{2}}}{6J(2J-1)}$	$\frac{9[3(J-1)(J+2)(2J-3)(2J+5)]^{\frac{1}{2}}}{70J(2J-1)}$	$\frac{27}{50J} \left[\frac{2(2J+3)(J-1)(J+2)}{7(2J-1)} \right]^{\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{10} \left[\frac{14(2J+3)(J+1)}{J(2J-1)} \right]^{\frac{1}{2}}$
$J-1$		$\frac{[2/7(J^2-4)(4J^2-25)]^{\frac{1}{2}}}{4J(2J-1)}$	$\frac{9}{28J(2J-1)} \left[\frac{3(4J^2-9)(J^2-4)}{J} \right]^{\frac{1}{2}}$	$\frac{9}{25J(2J-1)} \left[\frac{3(J^2-1)(4J^2-9)}{J} \right]^{\frac{1}{2}}$	
$J-2$		$\frac{[5(2J-5)(2J+3)(J-3)(J+2)]^{\frac{1}{2}}}{20J(2J-1)}$	$\frac{9[5(J-2)(2J-5)(J+1)(2J+3)]^{\frac{1}{2}}}{140J(2J-1)}$		
$J-3$		$\frac{[5(J-3)(J+1)(2J-7)(2J+3)]^{\frac{1}{2}}}{30J(2J-1)}$			

* The expressions given here must be multiplied by $\kappa Q(\partial^2 V/\partial r^2)_{r_0}$.

核スピン量子数 I と全角運動量量子数 F として、それぞれ I' , F' を持つ下位準位との間の遷移に関するスペクトル強度は、ラッセル・ソンドース・カップリング^[M4, M7] が成立する遷移と同様に取り扱い得るとする仮定^[16]を採用すると、超微細構造スペクトル線の強度は、

P ブランチの場合：

$$S_{FF''}(\gamma'I'J'F', \gamma''I''J'' + 1F'' + 1) = \frac{(F'' - I' + J' + 2)(F'' + I' + J' + 3)(F'' - I' + J' + 1)(F'' + I' + J' + 2)}{4(F'' + 1)} |\langle \gamma'J' : P : \gamma''J'' + 1 \rangle|^2 \quad \dots (4.8)$$

R ブランチの場合：

$$S_{FF''}(\gamma'I'J'F', \gamma''I''J'' - 1F'' - 1) = \frac{(F'' - I' + J' - 1)(F'' - I' + J')(F'' + I' + J' + 1)(F'' + I' + J')}{4F''} |\langle \gamma'J' : P : \gamma''J'' - 1 \rangle|^2 \quad \dots (4.9)$$

と記述される^[M7]。式(4.8)(4.9)の導出過程をAppendix 2 に示す。

係数 $|\langle \gamma'J' : P : \gamma''J'' + 1 \rangle|^2$ 及び $|\langle \gamma'J' : P : \gamma''J'' - 1 \rangle|^2$ は核スピンとは無関係な量であり、実験によって両者の回転スペクトル線の相対強度比 $|\langle \gamma'J' : P : \gamma''J'' + 1 \rangle|^2 / |\langle \gamma'J' : P : \gamma''J'' - 1 \rangle|^2$ を決定できる。この相対強度比については、回転準位間の遷移確率を表わすヘーネル・ロンドン因子(式(4.6))及びボルツマン分布を仮定する回転準位占有率(式(2.18))との積から推算することも可能ではあるが、第3章で検討したように希薄気体流れ中では厳密なボルツマン分布が成立していない可能性があることを考慮して、ここでは実験によりその相対強度比を求めスペクトル形状を計算することとした。

回転スペクトルの超微細構造の分裂位置(振動数)とその強度を用いて、個々の超微細構造スペクトル i を次式のようにローレンツ型及びドップラ型の複合スペクトル形状で表現する。

$$f_i(\nu) = \frac{S_{FF''i} \cdot \Delta\nu}{2\pi\nu_{oi}} \left(\frac{mc^2}{2\pi kT} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp\{-mc^2(\nu' - \nu_{oi})^2/2kT\nu_{oi}^2\}}{[(\nu - \nu_{oi}) - (\nu' - \nu_{oi})]^2 + (\Delta\nu/2)^2} d\nu' \quad (4.10)$$

さらに、回転スペクトル線が含む全ての超微細構造スペクトルの総和を次式によって求めることにより、回転スペクトル線のスペクトル形状 $\phi(\nu)$ を計算することが出来る。

$$\phi(\nu) = \sum_i f_i(\nu) \quad \dots (4.11)$$

均一幅(FWHM) $\Delta\nu$ は自然幅 $\Delta\nu_n$ と衝突幅 $\Delta\nu_h$ の和として表現されるが、それぞれ 581nm域(第5章で述べる実験波長域)に対して $\Delta\nu_n = 0.13\text{MHz}$ ^[H3] また Ar (添字1)と I₂ (添字2)の分子直径に基づく衝突幅^[M8]として、

$$\Delta\nu_h = 3.37 \times 10^{10} \sigma_1 \sigma_2 \sqrt{\frac{1}{M_{W_1}} + \frac{1}{M_{W_2}}} \frac{(9.87 \times 10^{-6} \cdot P)}{\pi \sqrt{T}} \quad \dots (4.12)$$

を用いた。式(4.12)では、分子直径として、光学的衝突径(Optical collision diameter)を用いる必要あるが、ここではそれに対応するデータがみあたらないので粘性係数等から決まる運動学的衝突径(Kinetic collision diameter)として、 $\sigma_1 = 3.33\text{\AA}$, $\sigma_2 = 4.98\text{\AA}$ を用いた^[G10]。光学的衝突径と運動学的衝突径との相違については、一般に光学的衝突径の方が大きいとされており^[M8, M20, M21]、運動学的直径及び式(4.12)を用いて推算される衝突幅は、実際の衝突幅よりも小さい値となる可能性があることに留意しておく必要がある。なお、式(4.12)に替わる式として文献[J10]に記載されている実験式もあるが、この

式で計算される衝突幅は大気圧760Torr, 室温298Kの条件に対し9120MHzと大きく, 同一条件下の筆者の実験で得られる値約1000MHzと大きく離れているために, 本研究では文献[J10]に記載の式は用いなかった。

スペクトル形状に対する圧力波長シフト(Pressure Shift)の影響について述べておく。 I_2 分子の圧力波長シフト量については高圧域において文献[J10]に実験式が記載されているが, 希薄な圧力域についてのデータはみあたらない。また, 文献[M20]では圧力波長シフト量は衝突幅半値半幅の5%以下であることが多いとの報告があり, I_2 分子の場合の大気圧, 室温のスペクトル幅にあてはめると, 圧力波長シフトは 10^5 Paの圧力変化に対し35MHz以下, 流速測定値に換算される誤差は20m/s以下であると推算される。しかし, I_2 に関するデータが明確でないことから本研究では圧力波長シフトについては考慮せず, 式(4.10)において圧力波長シフト補正項を導入しなかった。

回転スペクトル線のドップラシフト量を求める際に必要な回転スペクトル線中心に対応する周波数を式(4.11)で記述されるスペクトル形状の極大周波数に対応する点として, 定義する。それは

$$\frac{d\phi(\nu)}{d\nu} = 0 \quad \dots\dots\dots (4.13)$$

を満足する周波数として計算できる。ただし, 超微細構造を含む回転スペクトル線の形状は単一の極大点を有するとは限らないので注意を要する。複数のスペクトル極大点を有する場合にはスペクトル形状全体をみて, どの極大点が回転スペクトル線中心に対応するかを見極める作業が別途必要となる。詳細については, 本章4.3.3節にて検討する。

4.3 スペクトル・シミュレーション結果

4.3.1 B-Xバンドの回転スペクトル

本節では, 先の4.2節において導びいた理論を用いて, 具体的なスペクトル形状を計算し, それとドップラシフトとの関係を検討する。その際に, 次の第5章で説明する実験的研究との関連性から特定の回転スペクトル線((13, 0)バンドP13-R18ブランチ)に着目して, 議論を進める。

B-Xバンド内のどの回転スペクトル線に着目すべきかは基本的には任意であるが, ドップラシフト量測定の容易さの点からは, 着目すべき回転スペクトル線は孤立していることが望ましい。回転スペクトル線が孤立しているかどうかは実験で1本1本確認するのも一つの手法であるが, ここではスペクトルシミュレーションによって概略の傾向をつかんで, 実験で着目する回転スペクトル線を特定した後に, それに対する超微細構造スペクトル形状を計算する。

$T_{vib} = T_{rot} = 300$ KにおけるB-Xバンドの全体構造を図4.6に示す。図4.6においては, B-Xバンドが非常に多くの回転スペクトル線を含んでおり, その全部を表示すると構造が全く見えなくなるので, バンドヘッド部に存在するR0ブランチ及びP1ブランチの回転スペクトル線のみを示した。 $v'' > 62$ の信頼できる分子定数がないので, 図中の501nmより短い波長域のスペクトルは描いていない。B-Xバンドは530nm前後の波長域に強度の強い($v', 0$)バンドが存在し, それに($v', 1$)($v', 2$)なども重っている。 I_2 分子は O_2 分子とは異なり質量の大きな分子であるから, 常温レベルでも $v'' = 1$, $v'' = 2$ などの振動準位にある分子が多く存在する。したがって, そのスペクトルには($v', 1$)($v', 2$)が現われる。($v', 0$)($v', 1$)($v', 2$)のそれぞれのバンドグループ内においてスペクトル強度に周期的なうねりが存在するのは, 表4.4に示したフランク・コンドン因子の効果である。

図4.6に示した I_2 のB-Xバンドは可視光域490nm~630nmの範囲で広く分布する。 O_2 -LIPFにおいて回転温度を測定する際には, ある波長領域内の複数本の回転スペクトル線を必要としたのとは対照的に, 速度測定においては, 単一の回転スペクトル線のみ注目すれば良い。したがって, 回転スペクトル線強度がある程度強く, かつ, 着目する回転スペクトル線が他の回転スペクトル線と複雑に重なり合っていないければ, どの回転スペクトル線に着目しても良いと考えられる。そこで, 以下では著者が保有するリングダイレーザの波長を勘案して581nm前後の波長領域に絞って議論を進めることにする。

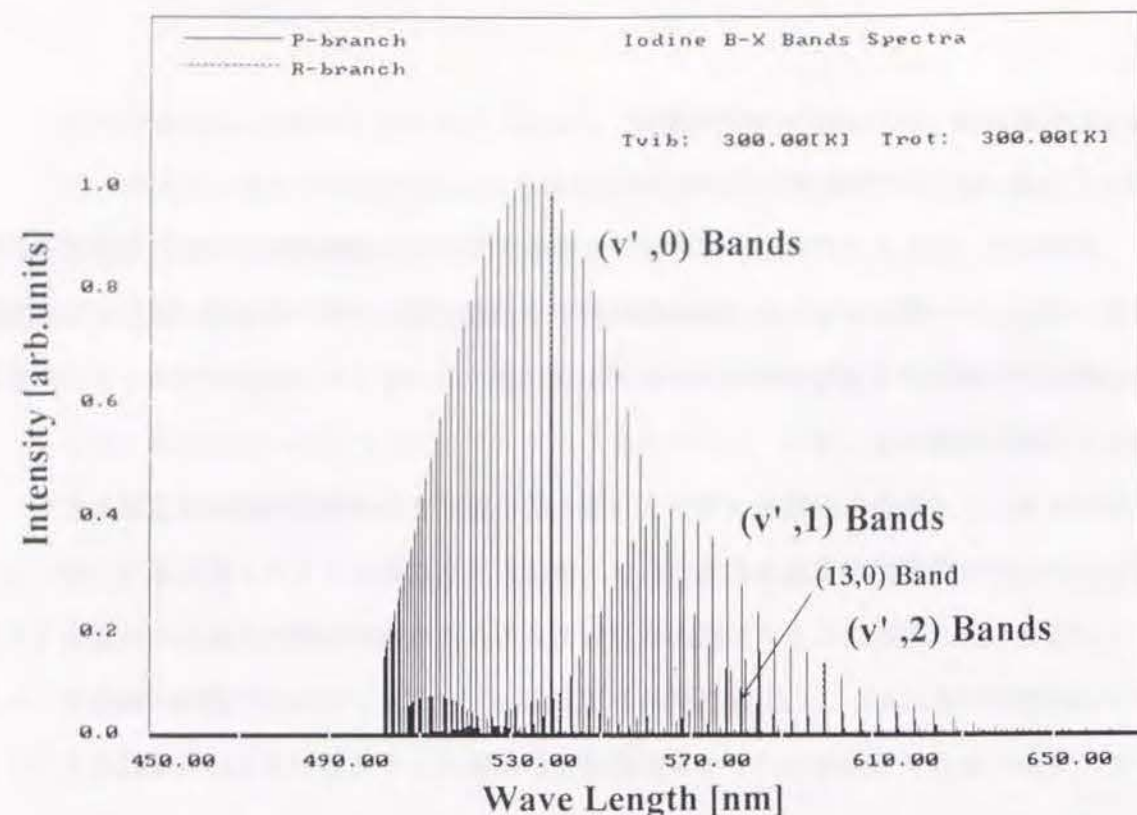


図4.6 B-Xバンドの計算結果（全体構造）

レーザ波長581nm 前後の波長580.0~582.2nmにおける $T_{vib} = T_{rot} = 300\text{K}$ の場合の回転スペクトルを図4.7に示す。(13, 0)(14, 0)(15, 1)(16, 1)(17, 2)(18, 2)バンドが重り合っていることがわかる。

図4.7中央に示す波長領域580.88~581.1nmをさらに拡大して、本研究で用いるレーザ波581.037nm近傍の回転スペクトルを図4.8(a)(b)(c)に示す。図4.8では回転スペクトル線の位置と強度をわかりやすくするために、線幅を無視し、強度を実線の長さとして無次元化して示している。次の第5章では超音速自由噴流内の流速測定を行うが、その場合の温度条件に対応する $T_{vib} = T_{rot} = 300\text{K}$, 200K, 100K の場合を取り上げて、それぞれの場合に対する計算結果を示した。温度の低下とともに、第5章における実験で着目する(13, 0)バンドが支配的になることがわかる。

図4.8(c)に示した $(v', v'') = (13, 0)$ バンドの100Kにおける回転スペクトルの計算結果を詳細に検討する。対応するブランチ番号は図中上部に示してある。B-Xバンドの場合には、PブランチとRブランチがペアとなって現われる場合が多いが、(13, 0)バンドでも $P(J)$ と $R(J+5)$ がペアとなって現われることがわかる。(13, 0)バンドは図4.8に示すように100K以下の温度以下では他のバンドとの重なりがなく、後のスペクトル形状測定が行い易い。そこで、この(13, 0)バンドから特にR18とP13のペアに着目して回転スペクトル線の超微細構造について理論的な検討を行う。R18, P13のペアは、スペクトルの密集するバンドヘッド近傍から離れ、しかも、低温域で回転占有率の低下する高位の回転準位からの遷移による

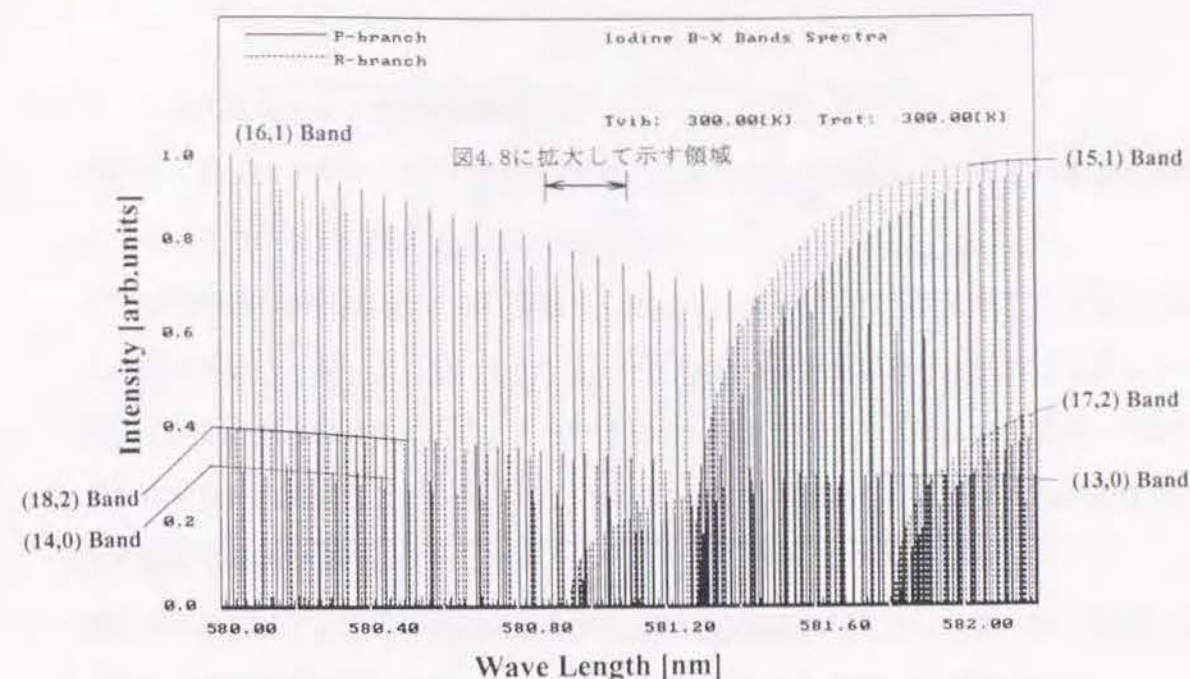


図4.7 B-Xバンドの計算結果（波長580.0~582.2nm）

ブランチではない。したがって、室温域でもこのペアは前後±約10GHz程度の波長範囲で孤立している。

図4.9に(13, 0)バンドのR18-P13ブランチを先と同様の方式で模式的に示す。P13とR18の中心波数は、それぞれ文献[H1]より $17210.615994\text{cm}^{-1}$ (581.036728nm), $17210.633717\text{cm}^{-1}$ (581.036129nm), 中心波数差(周波数差)は $1.7723 \times 10^{-2}\text{cm}^{-1}$ (531.33MHz)である。通常、回転スペクトル線は図4.9の様にスペクトル形状をもたない単なる線として扱われることが多いが、現実の I_2 回転スペクトル線は単なる線ではなく超微細構造をもつ複雑なスペクトル形状を示し、本研究で考察するドップラシフトを利用する速度測定では、図4.9に示す単純なスペクトル形状を取り扱うだけでは充分ではない。以下の節において、回転スペクトル線がどのようなスペクトル形状を実際に持つのかについて詳細に検討する。

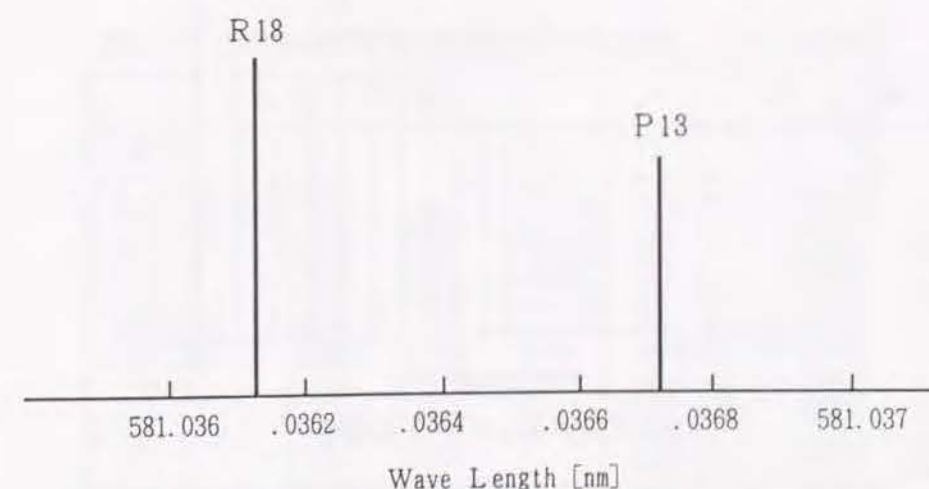
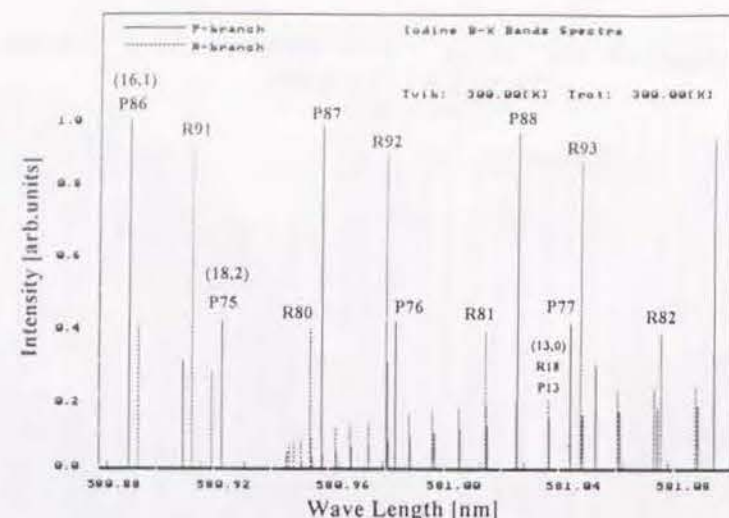
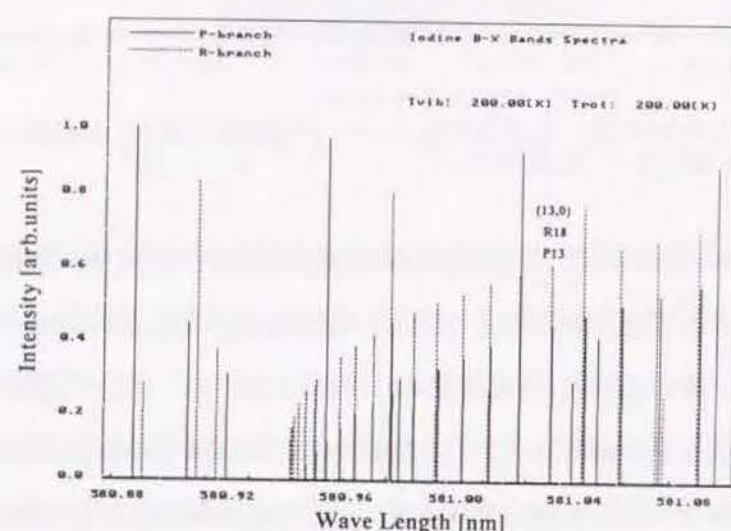


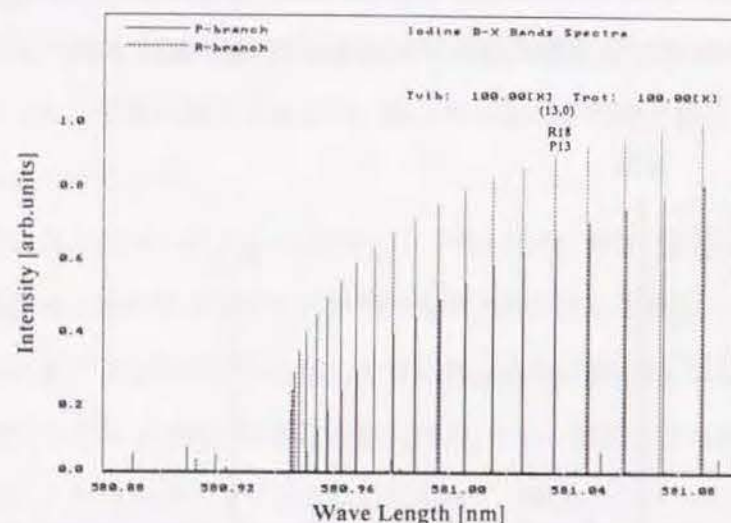
図4.9 (13, 0)バンドR18-P13ブランチ



(a) $T_{vib} = T_{rot} = 300K$ の場合



(b) $T_{vib} = T_{rot} = 200K$ の場合



(c) $T_{vib} = T_{rot} = 100K$ の場合

図4.8 B-Xバンドの計算結果(波長580.88~581.10nm)

4.3.2 P13-R18ブランチの超微細構造

図4.5に示すハミルトニアン行列の固有値の計算結果を文献値に示される計算値と比較することにより、まず計算の妥当性を検証する。

$J=12$ の場合の固有値に関する計算結果を表4.7に文献[16]に報告されている値と比較する。両者はよく一致している。また、 $J \rightarrow \infty$ の場合の固有値に関する計算値を表4.8に文献[15]記載の値と比較して示す。 $J \rightarrow \infty$ の場合、偶数ブランチ15本、奇数ブランチ21本がともに6本に縮退することが知られている^[15]。本計算結果は、縮退個数及び固有値ともに文献記載の値と良好に合致している。

図4.10にP13ブランチの超微細構造の各線に対する強度に関して、文献[13]に記載の値と比較した結果を図4.10に示す。両者は互いに良く合っていることが確認できる。

以上のように、本計算はいずれの観点から見ても合理的であると判断できる。

表4.7 超微細構造の計算結果の妥当性評価 ($J=12$ の場合)

文 献 [16] 値				本 計 算 値			
量子数				量子数			
I-odd, F=J+5 :	0.250000			I-odd, F=J+5 :	0.250000		
I-odd, F=J+4 :	0.037500			I-odd, F=J+4 :	0.037500		
I-odd, F=J+3 :	-0.122090	0.015025		I-odd, F=J+3 :	-0.122092	0.015010	
I-odd, F=J+2 :	-0.196245	0.028040		I-odd, F=J+2 :	-0.196246	0.028040	
I-odd, F=J+1 :	-0.240450	0.126115	-0.146800	I-odd, F=J+1 :	-0.240448	0.126047	-0.146740
I-odd, F=J :	-0.203970	-0.051740	0.280715	I-odd, F=J :	-0.203794	-0.051740	0.280573
I-odd, F=J-1 :	-0.197735	0.099590	-0.101850	I-odd, F=J-1 :	-0.197643	0.099576	-0.101933
I-odd, F=J-2 :	-0.061335	0.042585		I-odd, F=J-2 :	-0.061334	0.042584	
I-odd, F=J-3 :	0.096130	-0.019770		I-odd, F=J-3 :	0.096131	-0.019772	
I-odd, F=J-4 :	0.200545			I-odd, F=J-4 :	0.200543		
I-odd, F=J-5 :	0.117935			I-odd, F=J-5 :	0.117935		
I-even, F=J+4 :	0.100000			I-even, F=J+4 :	0.100000		
I-even, F=J+3 :	0.000000			I-even, F=J+3 :	0.000000		
I-even, F=J+2 :	0.029005	-0.158085		I-even, F=J+2 :	0.029021	-0.158068	
I-even, F=J+1 :	-0.152400	0.126040		I-even, F=J+1 :	-0.152400	0.126041	
I-even, F=J :	-0.222870	0.280825	-0.052525	I-even, F=J :	-0.222925	0.280573	-0.052211
I-even, F=J-1 :	-0.119045	0.099480		I-even, F=J-1 :	-0.119046	0.099481	
I-even, F=J-2 :	0.037705	-0.126020		I-even, F=J-2 :	0.037706	-0.126021	
I-even, F=J-3 :	0.061140			I-even, F=J-3 :	0.061141		
I-even, F=J-4 :	0.127175			I-even, F=J-4 :	0.127177		

表4.8 超微細構造の計算結果の妥当性評価 ($J=\infty$ の場合)

文 献 [15] 値				本 計 算 値			
量子数				量子数			
I-odd, F=J+5 :	0.250000			I-odd, F=J+5 :	0.250000		
I-odd, F=J+4 :	0.100000			I-odd, F=J+4 :	0.099938		
I-odd, F=J+3 :	-0.050000	0.025000		I-odd, F=J+3 :	-0.050070	0.024966	
I-odd, F=J+2 :	-0.125000	0.025000		I-odd, F=J+2 :	-0.125081	0.025000	
I-odd, F=J+1 :	-0.200000	0.100000	-0.125000	I-odd, F=J+1 :	-0.200050	0.100025	-0.125031
I-odd, F=J :	-0.200000	-0.050000	0.150000	I-odd, F=J :	-0.200025	-0.050006	0.250031
I-odd, F=J-1 :	-0.200000	0.100000	-0.125000	I-odd, F=J-1 :	-0.200000	0.100000	-0.125000
I-odd, F=J-2 :	-0.125000	0.025000		I-odd, F=J-2 :	-0.124950	0.025006	
I-odd, F=J-3 :	-0.050000	0.025000		I-odd, F=J-3 :	-0.049950	0.025031	
I-odd, F=J-4 :	0.100000			I-odd, F=J-4 :	0.100088		
I-odd, F=J-5 :	0.250000			I-odd, F=J-5 :	0.250063		
I-even, F=J+4 :	0.100000			I-even, F=J+4 :	0.100000		
I-even, F=J+3 :	0.025000			I-even, F=J+3 :	0.024975		
I-even, F=J+2 :	0.025000	-0.125000		I-even, F=J+2 :	0.025010	-0.125013	
I-even, F=J+1 :	-0.125000	0.100000		I-even, F=J+1 :	-0.125031	0.100025	
I-even, F=J :	-0.200000	0.250000	-0.050000	I-even, F=J :	-0.200025	0.250031	-0.050006
I-even, F=J-1 :	-0.125000	0.100000		I-even, F=J-1 :	-0.125000	0.100000	
I-even, F=J-2 :	0.025000	-0.125000		I-even, F=J-2 :	0.025006	-0.125000	
I-even, F=J-3 :	0.025000			I-even, F=J-3 :	0.025031		
I-even, F=J-4 :	0.100000			I-even, F=J-4 :	0.100025		

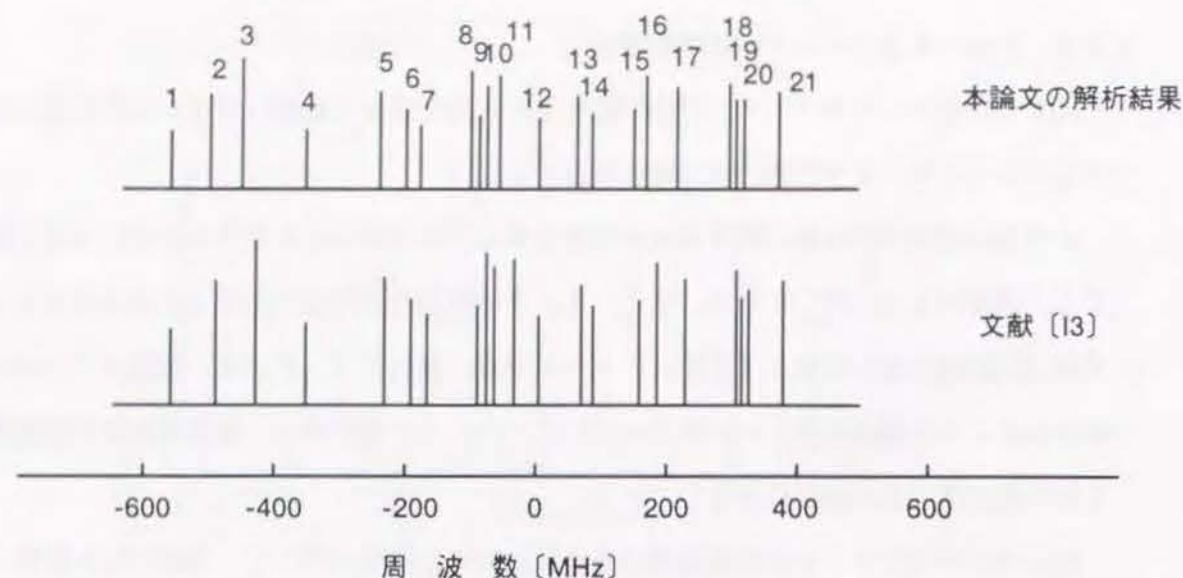


図4.10 超微細構造計算結果の妥当性 (P13ブランチの構造)

表4.9(a)(b)にP13, R18の固有値計算結果を示す。

また, 表4.10に表4.9より求めたP13-R18ブランチの固有値と対応する共鳴周波数を示す。表4.9及び表4.10の計算値を式(4.10)及び式(4.11)に適用することにより, 超微細構造を含む I_2 回転スペクトル形状を理論的に計算できる。計算されたスペクトル形状は I_2 速度計測を行う場合の回転スペクトル線の波長ドップラシフト量を決定する際の基準となるものである。

表4.9 超微細構造の計算結果

(a) P13の場合

```
***** Eigen Values *****
J=      : 13
I=odd , F=J+5 : 0.250000
I=odd , F=J+4 : 0.042308
I=odd , F=J+3 : -0.116362 0.015191
I=odd , F=J+2 : -0.191579 0.027656
I=odd , F=J+1 : -0.238204 0.123992 -0.145634
I=odd , F=J   : -0.204997 -0.052043 0.278271
I=odd , F=J-1 : -0.197559 0.099592 -0.105803
I=odd , F=J-2 : -0.066601 0.039755
I=odd , F=J-3 : 0.087814 -0.020737
I=odd , F=J-4 : 0.191846
I=odd , F=J-5 : 0.312308

***** Frequency of Hyperfine Lines *****
F=J+5, I=5 -484.225 [MHz]
F=J+4, I=5 -81.946 [MHz]
F=J+3, I=5 225.381 [MHz]
F=J+3, I=3 -29.424 [MHz]
F=J+2, I=5 371.069 [MHz]
F=J+2, I=3 -53.566 [MHz]
F=J+1, I=5 461.377 [MHz]
F=J+1, I=3 -240.159 [MHz]
F=J+1, I=1 282.079 [MHz]
F=J , I=5 397.058 [MHz]
F=J , I=3 100.803 [MHz]
F=J , I=1 -538.983 [MHz]
F=J-1, I=5 204.929 [MHz]
F=J-1, I=3 -192.901 [MHz]
F=J-1, I=1 382.652 [MHz]
F=J-2, I=5 129.000 [MHz]
F=J-2, I=3 -77.002 [MHz]
F=J-3, I=5 -170.087 [MHz]
F=J-3, I=3 40.165 [MHz]
F=J-4, I=5 -371.587 [MHz]
F=J-5, I=5 -604.909 [MHz]
```

(b) R18の場合

```
***** Eigen Values *****
J=      : 18
I=even , F=J+4 : 0.100000
I=even , F=J+3 : 0.008333
I=even , F=J+2 : 0.026884 -0.146736
I=even , F=J+1 : -0.144174 0.117150
I=even , F=J   : -0.215734 0.270536 -0.052411
I=even , F=J-1 : -0.122326 0.099707
I=even , F=J-2 : 0.031849 -0.125301
I=even , F=J-3 : 0.047976
I=even , F=J-4 : 0.117619

***** Frequency of Hyperfine Lines *****
F=J+4, I=4 -193.690 [MHz]
F=J+3, I=4 -16.141 [MHz]
F=J+2, I=4 -52.071 [MHz]
F=J+2, I=2 284.213 [MHz]
F=J+1, I=4 279.250 [MHz]
F=J+1, I=2 -226.907 [MHz]
F=J , I=4 417.856 [MHz]
F=J , I=2 -524.002 [MHz]
F=J , I=0 101.534 [MHz]
F=J-1, I=4 236.933 [MHz]
F=J-1, I=2 -193.122 [MHz]
F=J-2, I=4 -61.687 [MHz]
F=J-2, I=2 242.695 [MHz]
F=J-3, I=4 -92.925 [MHz]
F=J-4, I=4 -227.816 [MHz]
```

表4.10 P13-R18の超微細構造の計算結果

Line Number	Branch Name	Relative Frequency [MHz]	I	F-J
1	P13	-604.909	5	-5
2	P13	-538.983	1	0
3	P13	-484.225	5	5
4	P13	-371.587	5	-4
5	P13	-240.159	3	1
6	P13	-192.901	3	-1
7	P13	-170.087	5	-3
8	P13	-81.947	5	4
9	P13	-77.002	3	-2
10	P13	-53.566	3	2
11	P13	-29.424	3	3
12	P13	40.165	3	-3
13	P13	100.803	3	0
14	P13	129.000	5	-2
15	P13	204.929	5	-1
16	P13	225.381	5	3
17	P13	282.079	1	1
18	P13	371.069	5	2
19	P13	382.652	1	-1
20	P13	397.058	5	0
21	P13	461.377	5	1
22	R18	7.328	2	0
23	R18	303.514	4	-4
24	R18	304.423	2	1
25	R18	337.640	4	4
26	R18	338.208	2	-1
27	R18	438.405	4	-3
28	R18	469.643	4	-2
29	R18	479.259	4	2
30	R18	515.189	4	3
31	R18	632.864	0	0
32	R18	768.263	4	-1
33	R18	774.025	2	-2
34	R18	810.580	4	1
35	R18	815.543	2	2
36	R18	949.186	4	0

4.3.3 スペクトル形状の計算結果

以上の理論的検討に基づいて、本節では具体的な圧力、温度条件におけるスペクトル形状を計算する試みを行う。スペクトル形状の圧力、温度による相違を明確にしておくことは、次の第5章の I_2 -LIF実験における波長ドップラシフト量の計測に有用な情報となる。

図4.11に I_2 の典型的な3つのスペクトル形状の計算結果を示す。横軸にはP13の固有値に対応する周波数に基づいて原点を定めた周波数をとった。なお、図4.11を計算する際に用いるP13とR18の相対強度比は、次第5章に詳述する実験結果より $|\gamma'J' : P : \gamma''J'' + 1|^2 / |\gamma'J' : P : \gamma''J'' - 1|^2 = 0.7$ とした。それぞれの図中には、表4.9の番号に対応したP13及びR18ブランチの超微細構造の位置、及び式(4.8)及び(4.9)による蛍光強度の計算値を実線の長さとして無次元表示した強度分布を示した。

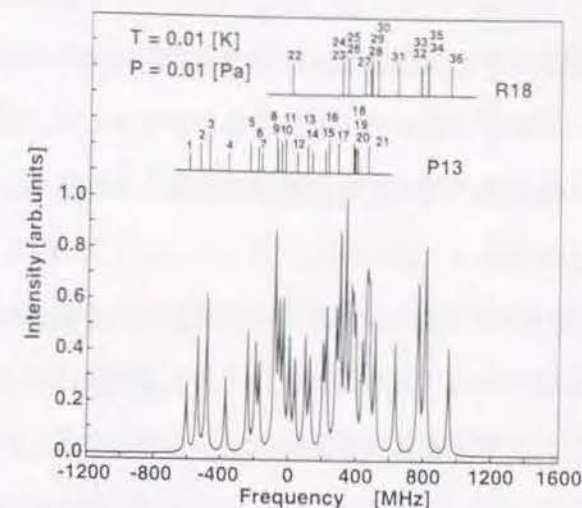
図4.11(a)の場合(以下『タイプI』と云う)には I_2 の並進温度(0.01K)及び圧力(0.01Pa)が極めて低いので次式で示されるドップラ幅

$$\Delta\nu_D = 2\nu_0 \left(\frac{2kT \ln 2}{mc^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad \dots\dots\dots (4.14)$$

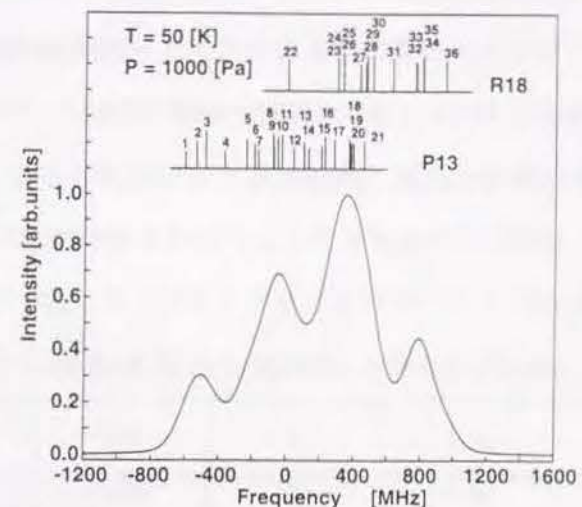
及び衝突幅 $\Delta\nu_h$ の影響は強くなく個々の超微細構造が自然幅のみを有し、互いに重り合わずほぼ独立して現われている。式(4.11)に示したように、強度分布については超微細構造が互いに重なっている場合には、相加的に強くなるので、例えばP13のNo.8とNo.9, R18のNo.24とNo.23, R18のNo.25とNo.26などでは強度が強くなって現われている。

図4.11(b)に4山パターンのスペクトル形状を示す(以下『タイプII』と云う)。この温度(50K)では、ドップラ幅が表4.9で示した超微細構造の平均間隔数十MHz以上となる温度域であるので個々の超微細構造はもはや見えなくなる。しかし、超微細構造の元々の強度分布を反映し、非対称なスペクトル形状となり、P13-R18ブランチの場合には4つの山となって現われる。図の上にした超微細構造と山の位置を比較すると、個々の山は超微細構造が密集している位置と対応していることがわかる。P13単独であれば3山、また、R18単独であれば3山となって現われるはずであり、P13とR18が偶然1山分だけ振動数がシフトしているので4山に観測されるものである。

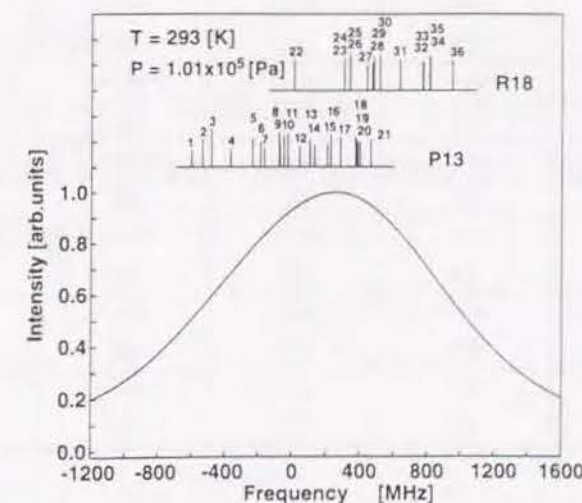
図4.11(c)に室温雰囲気でのスペクトル形状を示す(以下『タイプIII』と云う)。この温度ではもはや4山スペクトル形状も現れない。式(4.13)及び式(4.12)のドップラ幅及び衝突幅が4山ピークのピッチよりも大きいからである。スペクトル形状は全体的には対称に見えるが厳密には非対称である。



Type I (a) 自然幅のみの場合 (T=0.01K, P=0.01Pa)



Type II (b) 4山パターンの場合 (T=50K, P=10³ Pa)



Type III (c) 単一でブロードな場合 (T=293K, P=10⁵Pa)

図4.11 I_2 のスペクトル形状の分類

圧力、温度をそれぞれ $1 \times 10^{-2} \sim 1 \times 10^5$ [Pa], $1 \times 10^{-2} \sim 300$ [K] の範囲で変更した。

図4.12～図4.19に、表4.11にまとめた各条件に対する計算結果を示す。各図では圧力を一定とし、温度を変化させた場を1グループとしてまとめて示した。以下においては図4.12～図4.19を参照しながら各圧力ごとに超微細構造の特徴を吟味する。

(i) $P = 0.01 \sim 1.0$ [Pa] の場合

図4.12、図4.13及び図4.14では圧力が異なっているが、温度に対するスペクトルの変化様式はほとんど等しく、かつ、圧力によるスペクトル形状の変化も見られない。この理由は図4.20に示したドップラ幅及び衝突幅の図から説明することができる。1.0 Pa以下の圧力ではドップラ幅（図4.20の点線）に比べて常に圧力による衝突幅の方が小さく、スペクトル形状はドップラ幅のみによって決定されることが首肯できる。

一般に、ドップラ幅及び衝突幅の双方が、超微細構造の平均間隔数十MHzよりも十分小さい10MHz以下のスペクトル幅である場合には、超微細構造が一本一本識別出来る図4.11で説明したタイプIのスペクトル形状を示す。しかし、それらの内いずれかが10MHzを超えると超微細構造は次第に明確でなくなり、タイプII、タイプIIIのスペクトル形状へ移行する。10K付近ではタイプIとタイプIIの中間的スペクトル形状を示す。

表4.11 スペクトル形状の計算条件

$\begin{matrix} T [K] \\ P [Pa] \end{matrix}$	0.01	0.1	1	10	100	300
10^{-2}	図4.12 (a)	← (b)	← (c)	← (d)	← (e)	← (f)
10^{-1}	図4.13 (a)	← (b)	← (c)	← (d)	← (e)	← (f)
10^0	図4.14 (a)	← (b)	← (c)	← (d)	← (e)	← (f)
10^1	図4.15 (a)	← (b)	← (c)	← (d)	← (e)	← (f)
10^2	図4.16 (a)	← (b)	← (c)	← (d)	← (e)	← (f)
10^3	図4.17 (a)	← (b)	← (c)	← (d)	← (e)	← (f)
10^4	図4.18 (a)	← (b)	← (c)	← (d)	← (e)	← (f)
10^5	図4.19 (a)	← (b)	← (c)	← (d)	← (e)	← (f)

(ii) $P = 10$ [Pa] の場合

図4.15の場合には、温度0.01Kに対する結果の方が温度0.1Kの場合(b)に比べてスペクトル形状が鈍っており、その点で図4.12～図4.14の場合とやや傾向が異なっている。 $P = 10$ [Pa] の場合には、図4.20よりドップラ幅と衝突幅の大小関係が約0.1K付近を堺に逆転する（本論文ではこの点を「逆転温度」と名付ける）ことがわかる。この逆転温度より温度が低い場合には衝突幅が、また、高い場合にはドップラ幅が大きくなるので、式(4.10)で示される複合スペクトル形状としては、逆転温度近傍で最も超微細構造が明確となる。高い温度域ではドップラ幅が大きく支配的となるため、図4.12～図4.14の場合とスペクトル形状はほとんど同じである。

(iii) $P = 100$ [Pa] の場合

圧力がこの値まで高くなると、ドップラ幅、衝突幅のいずれかが常に自然幅よりも大きいので、超微細構造は見えない。逆転温度 ≈ 1 Kなので、上の(ii)に示した理由から1K近傍のスペクトル形状が最も分解能が高く、それより温度が低いと、衝突幅の増大のためにスペクトル形状はブロードになる。

(iv) $P = 1000$ [Pa] の場合

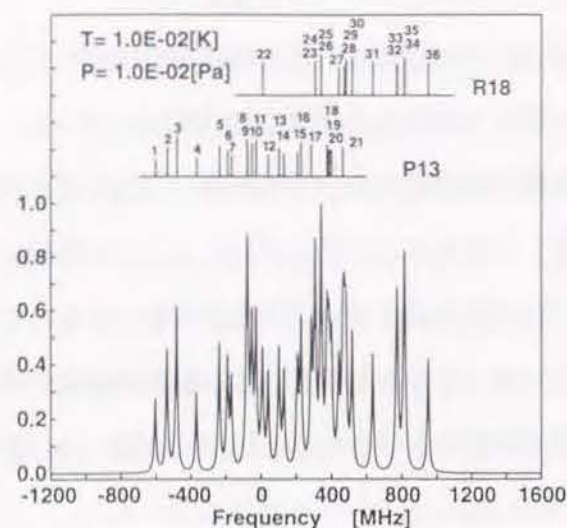
この圧力域では、タイプIIとタイプIIIのスペクトル形状のみが現れる。ドップラ幅、衝突幅のいずれかが4山ピッチの100MHzオーダ以上となっており、このため超微細構造は観測されることはない。

(v) $P = 10000$ [Pa] の場合

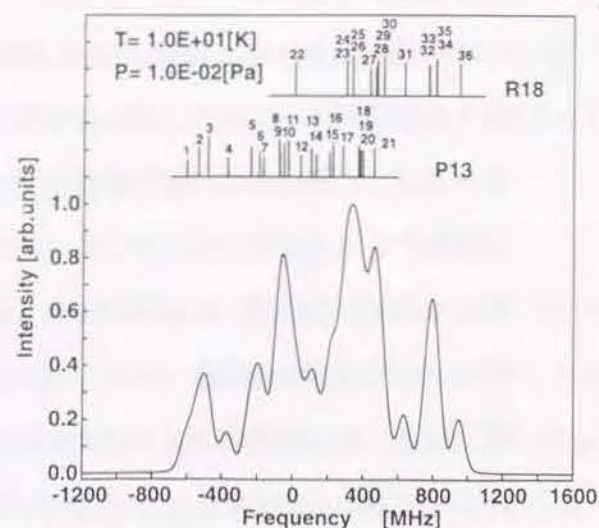
この圧力では、4山パターンのタイプIIのスペクトル形状も観測されなくなる。ドップラ幅、衝突幅のいずれかが300MHz以上あるので、4山パターンはかくれてしまう。

(vi) $P = 10^5$ [Pa] の場合

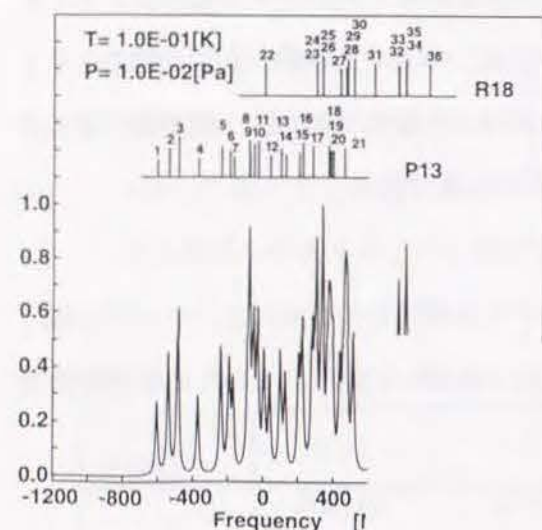
この圧力では、スペクトル形状は完全にブロードであり、ガウス分布に似たスペクトル形状タイプIIIを示す。室温では特に(f)の形状となり、流速測定における基準スペクトルとして利用できる。



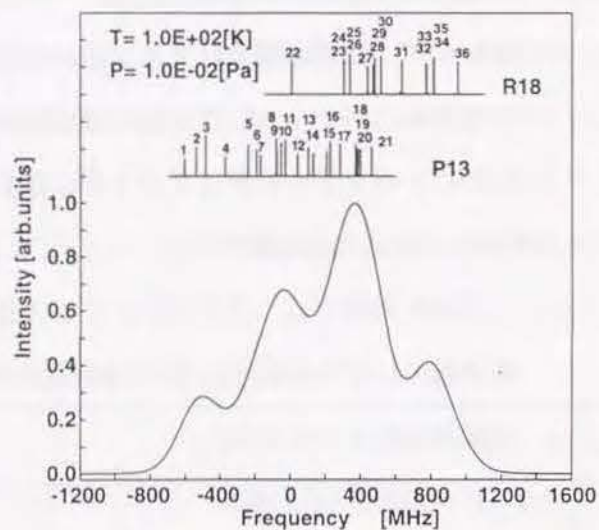
(a) $T=0.01$ [K]の場合



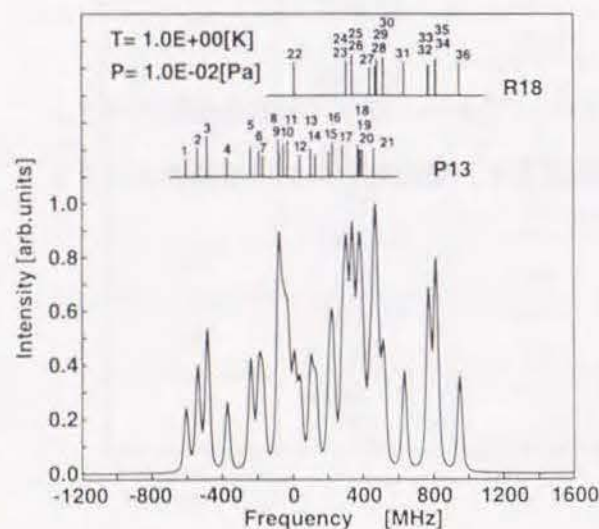
(d) $T=10$ [K]の場合



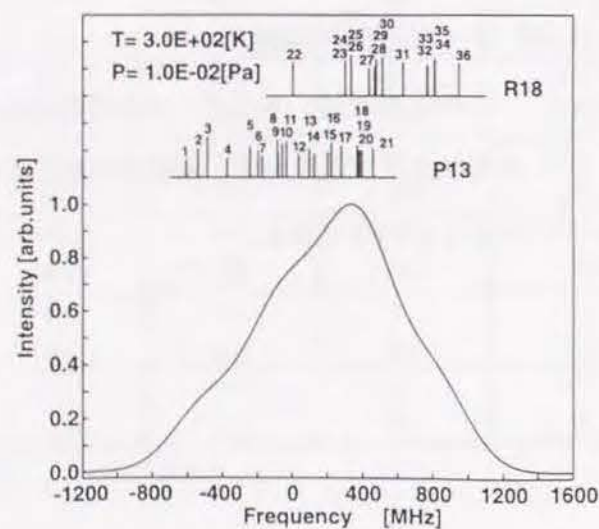
(b) $T=0.1$ [K]の場合



(e) $T=100$ [K]の場合

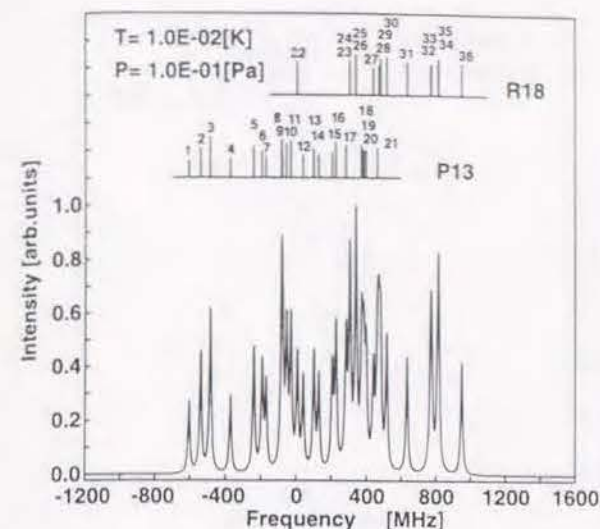


(c) $T=1$ [K]の場合

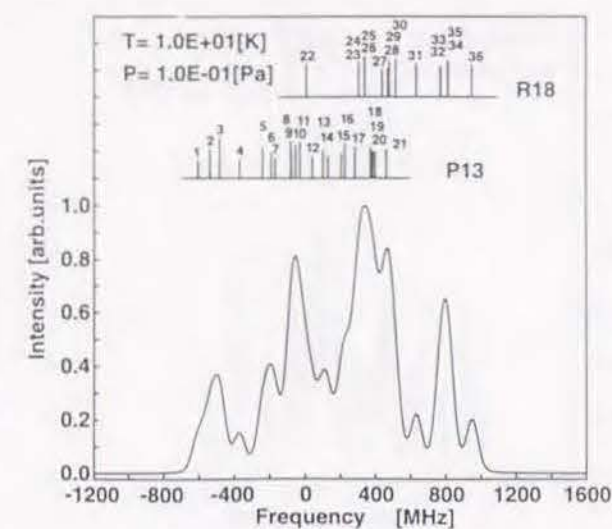


(f) $T=300$ [K]の場合

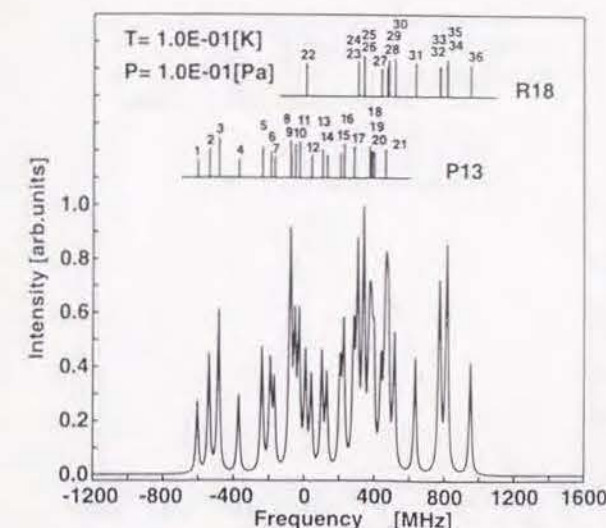
図4.12 超微細構造スペクトル計算結果 ($P=0.01$ [Pa]の場合)



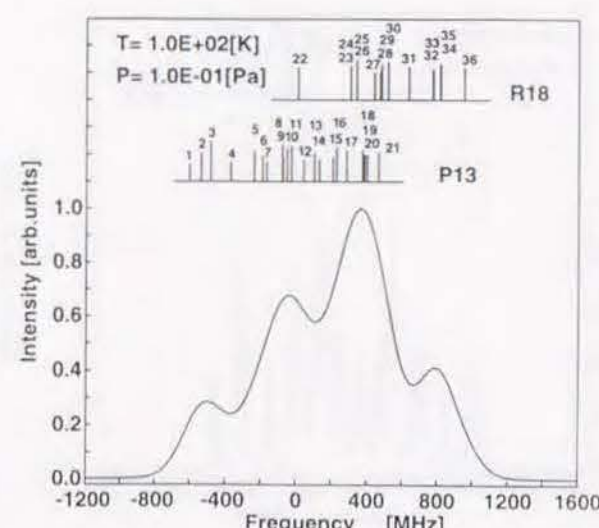
(a) $T=0.01$ [K]の場合



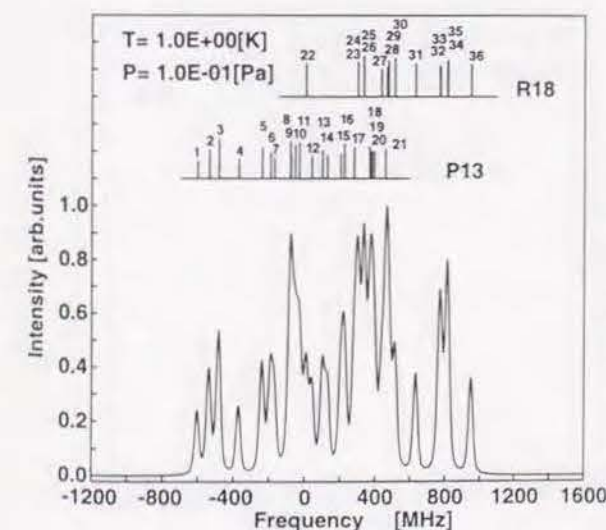
(d) $T=10$ [K]の場合



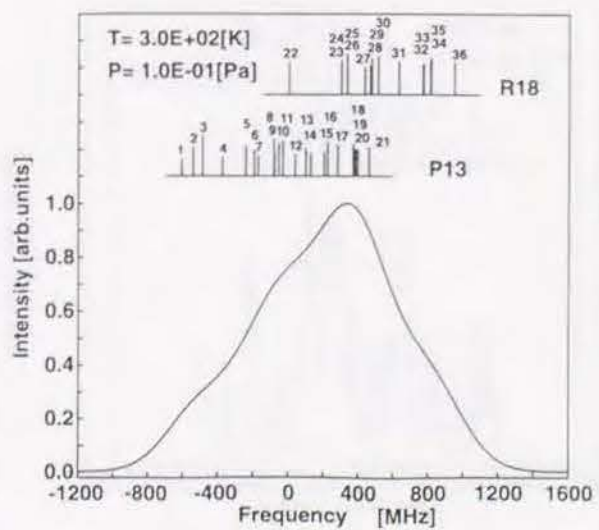
(b) $T=0.1$ [K]の場合



(e) $T=100$ [K]の場合

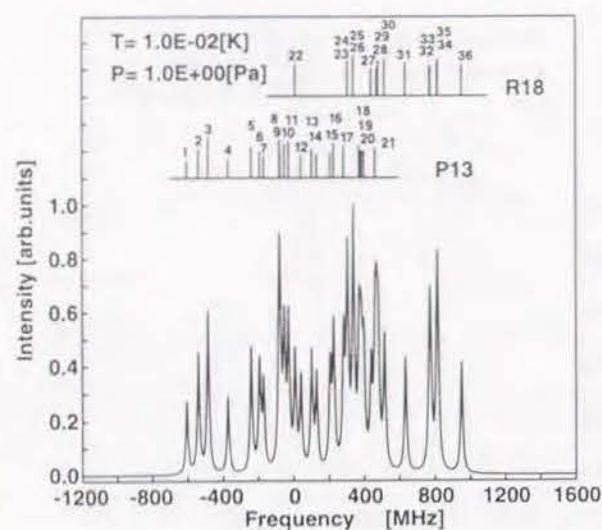


(c) $T=1$ [K]の場合

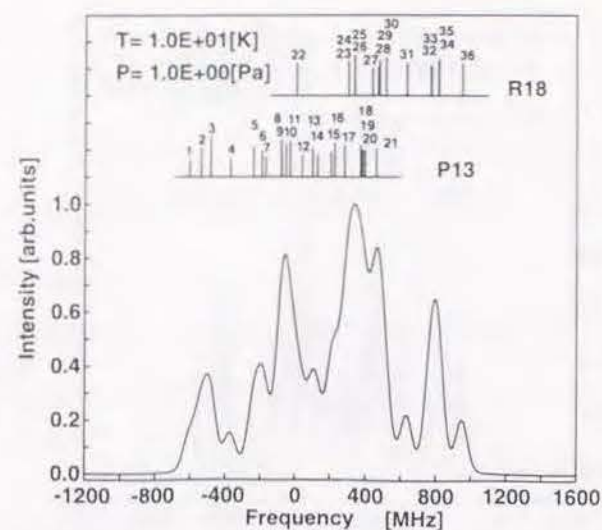


(f) $T=300$ [K]の場合

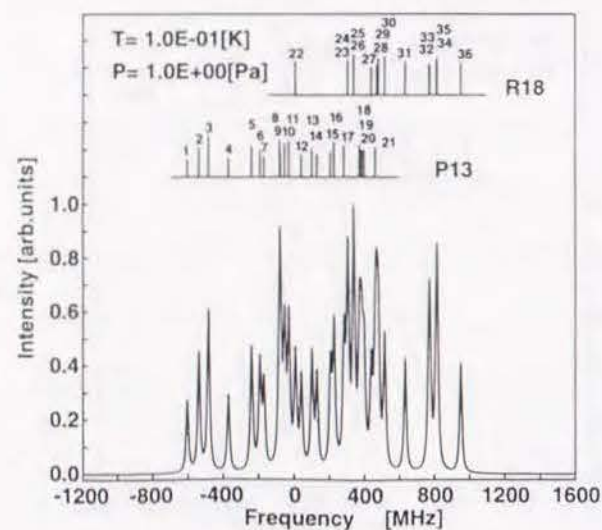
図4.13 超微細構造スペクトル計算結果 ($P=0.1$ [Pa]の場合)



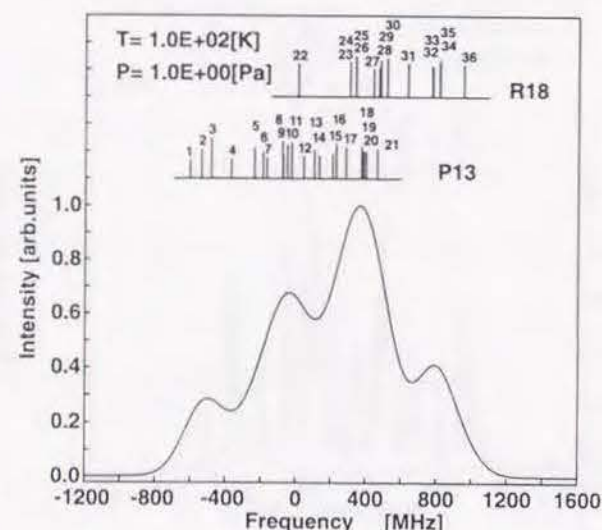
(a) $T=0.01[\text{K}]$ の場合



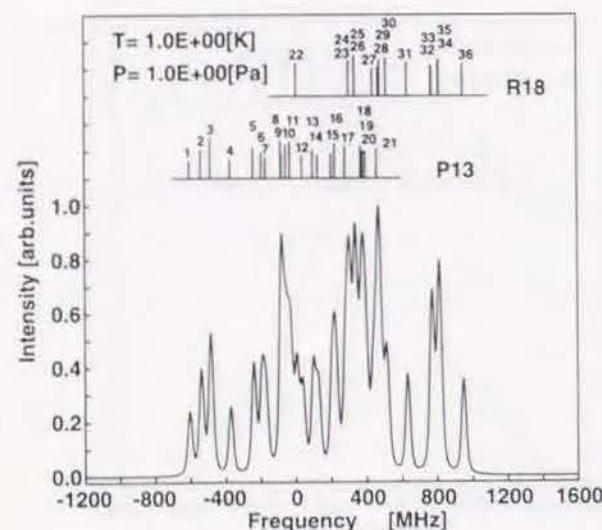
(d) $T=10[\text{K}]$ の場合



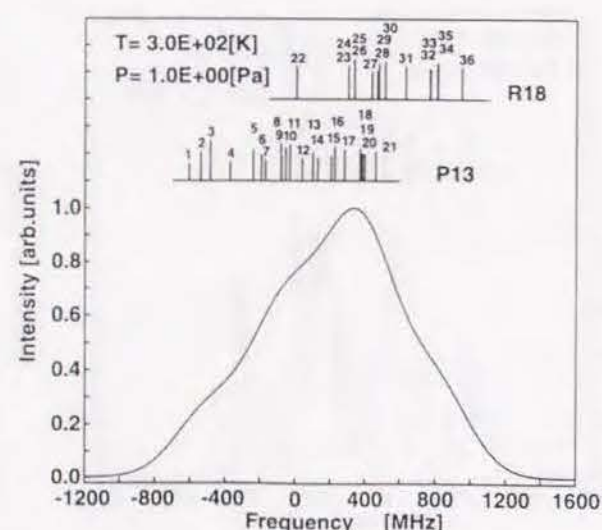
(b) $T=0.1[\text{K}]$ の場合



(e) $T=100[\text{K}]$ の場合

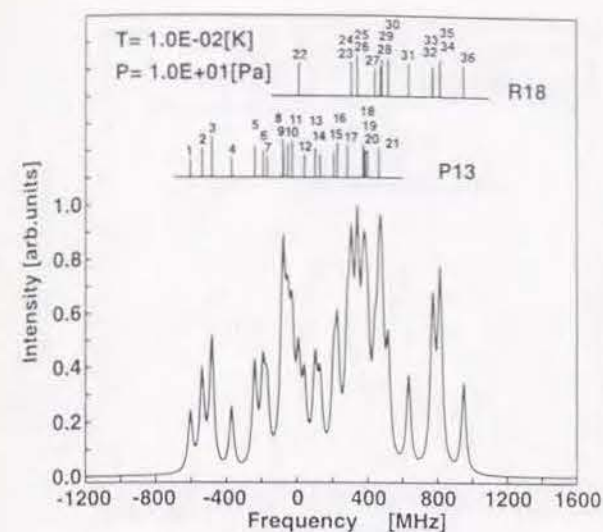


(c) $T=1[\text{K}]$ の場合

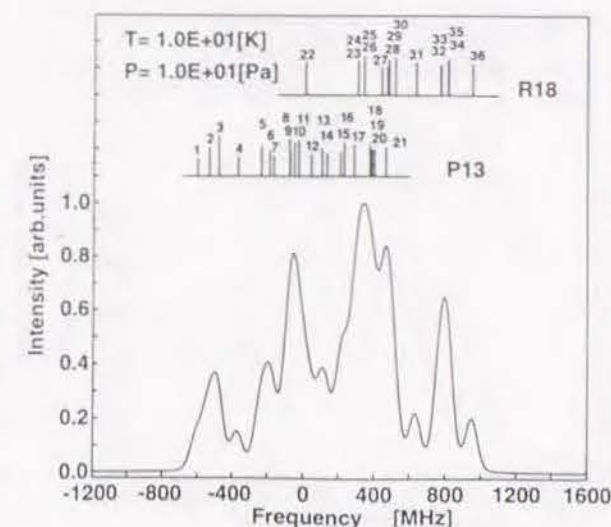


(f) $T=300[\text{K}]$ の場合

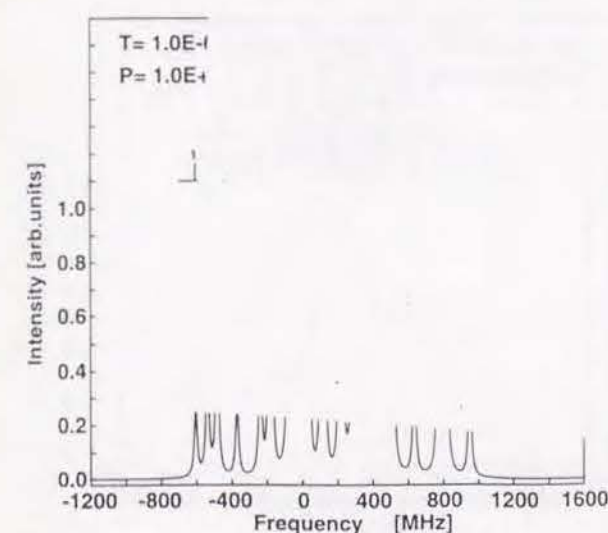
図4.14 超微細構造スペクトル計算結果 ($P=1[\text{Pa}]$ の場合)



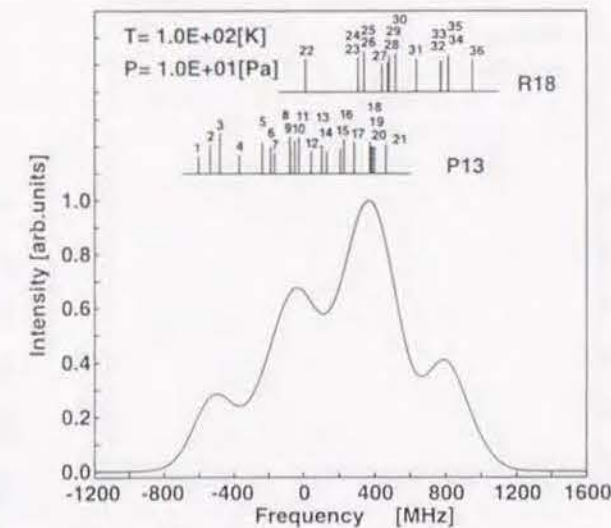
(a) $T=0.01[\text{K}]$ の場合



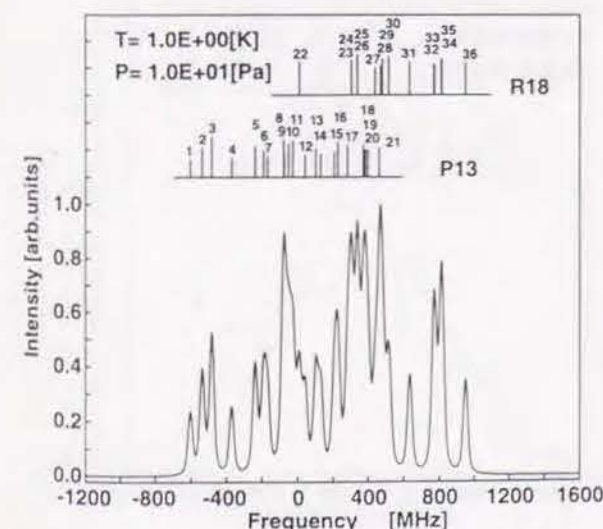
(d) $T=10[\text{K}]$ の場合



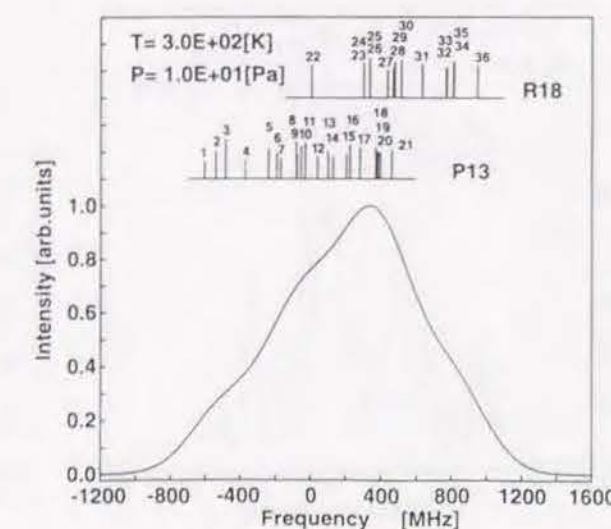
(b) $T=0.1[\text{K}]$ の場合



(e) $T=100[\text{K}]$ の場合

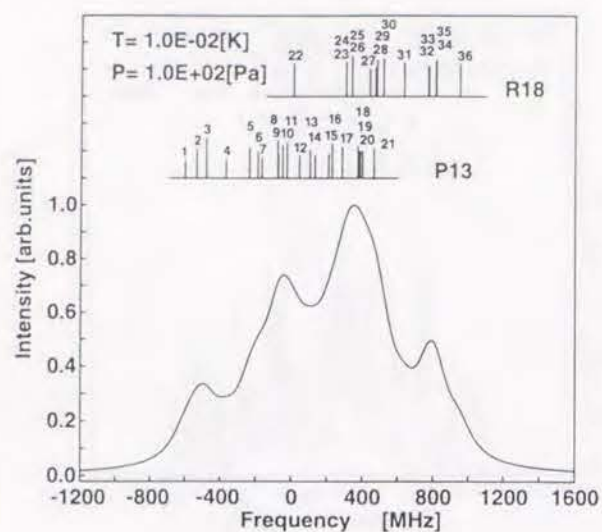


(c) $T=1[\text{K}]$ の場合

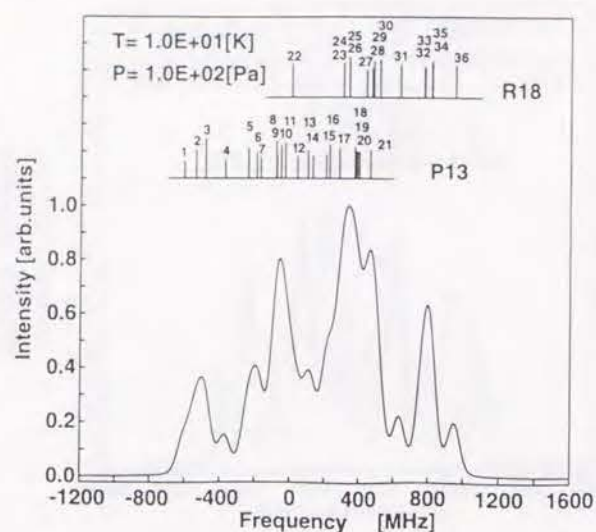


(f) $T=300[\text{K}]$ の場合

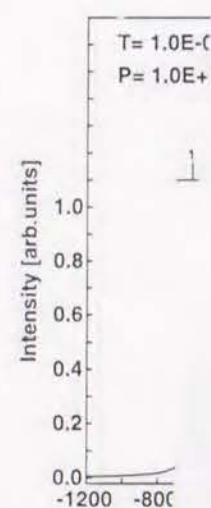
図4.15 超微細構造スペクトル計算結果 ($P=10[\text{Pa}]$ の場合)



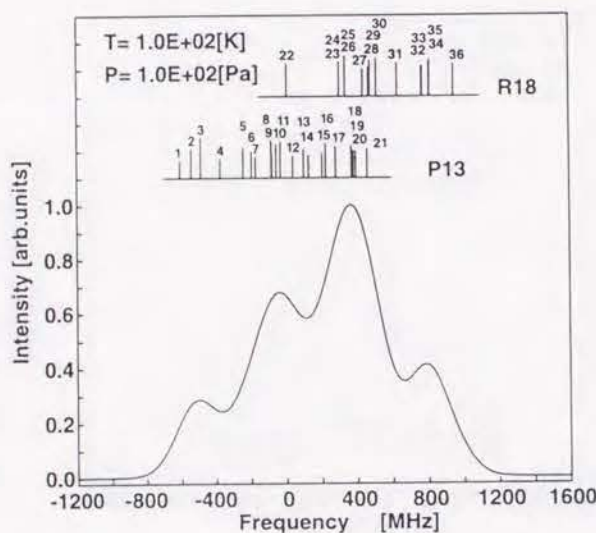
(a) $T=0.01$ [K]の場合



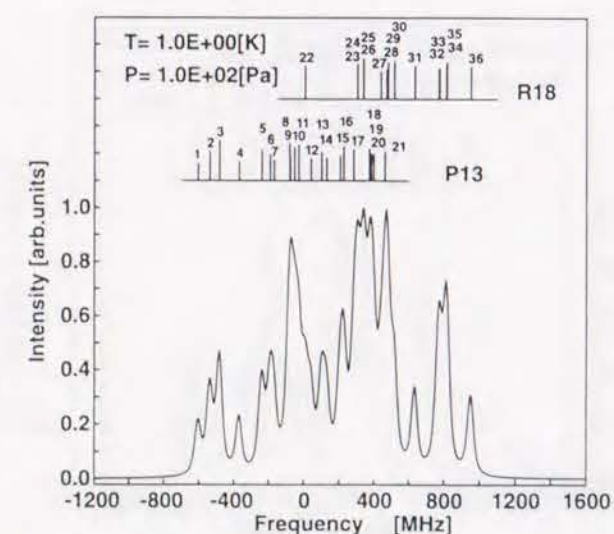
(d) $T=10$ [K]の場合



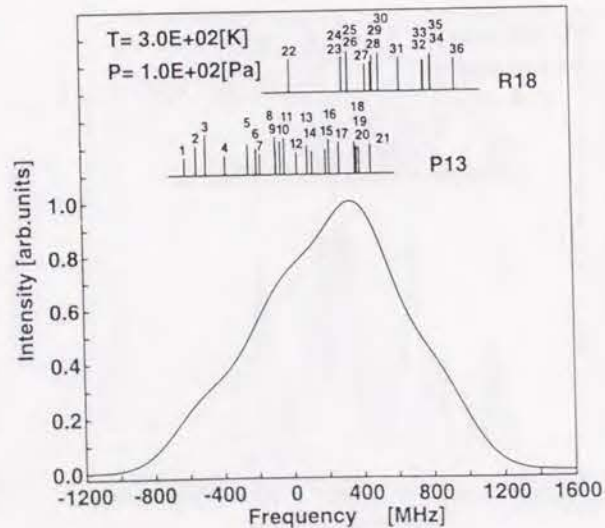
(b) $T=0.1$ [K]の場合



(e) $T=100$ [K]の場合

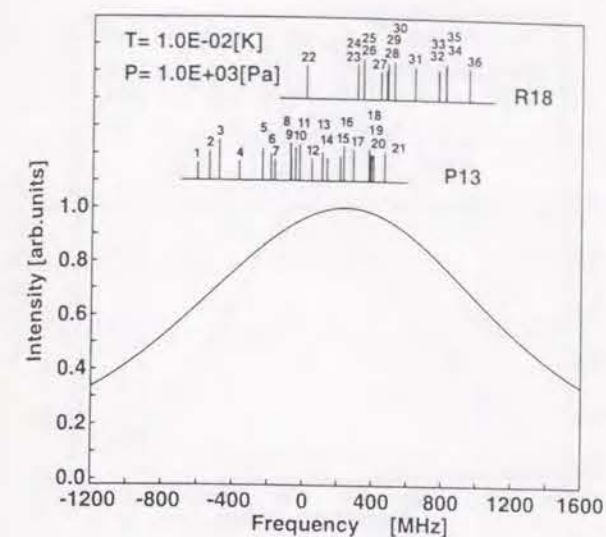


(c) $T=1$ [K]の場合

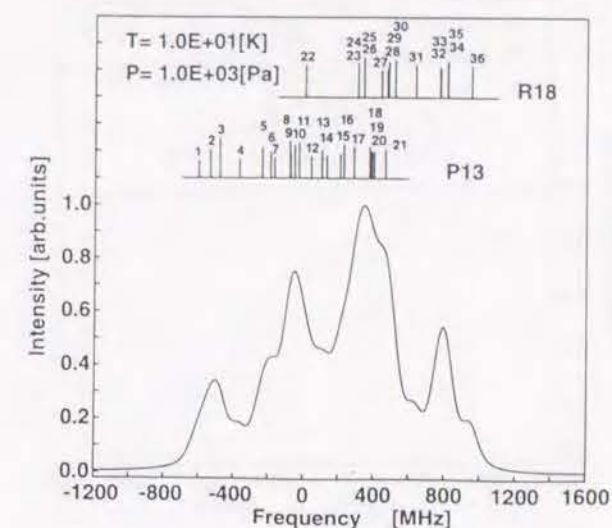


(f) $T=300$ [K]の場合

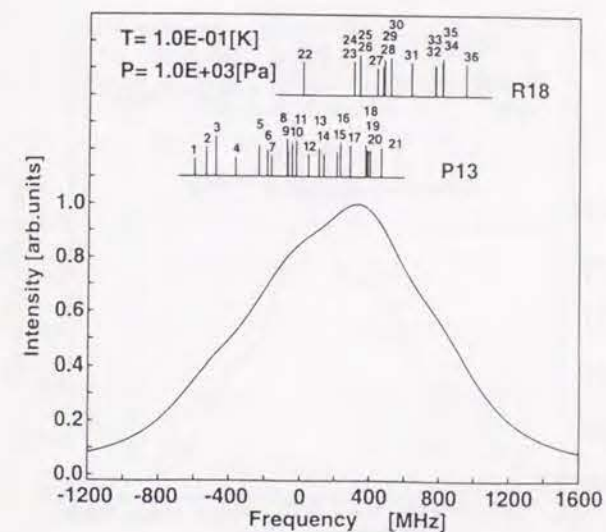
図4.16 超微細構造スペクトル計算結果 ($P=100$ [Pa]の場合)



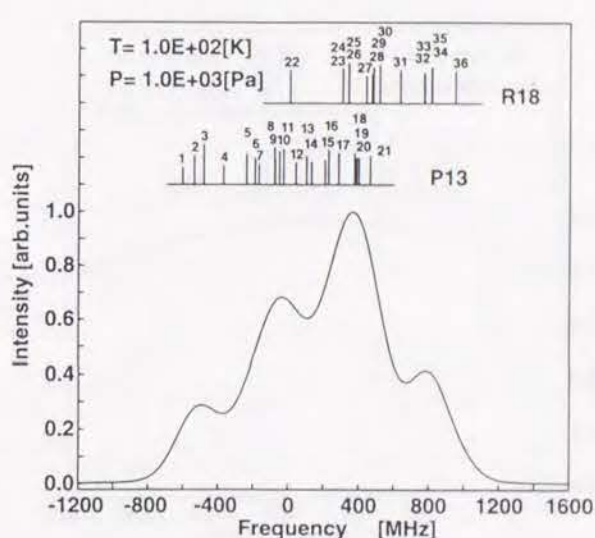
(a) $T=0.01$ [K]の場合



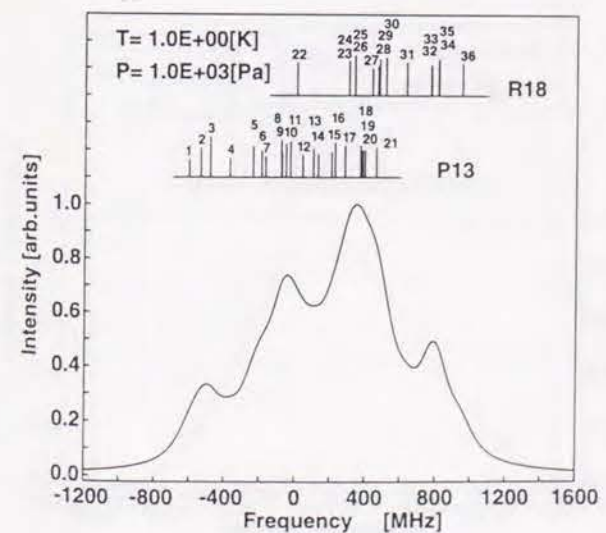
(d) $T=10$ [K]の場合



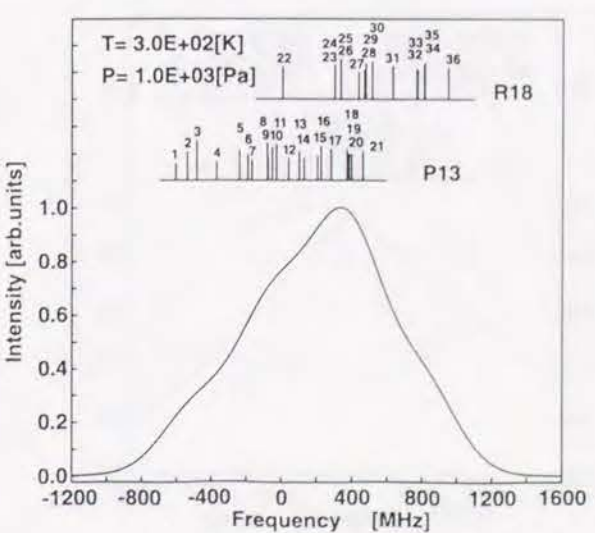
(b) $T=0.1$ [K]の場合



(e) $T=100$ [K]の場合

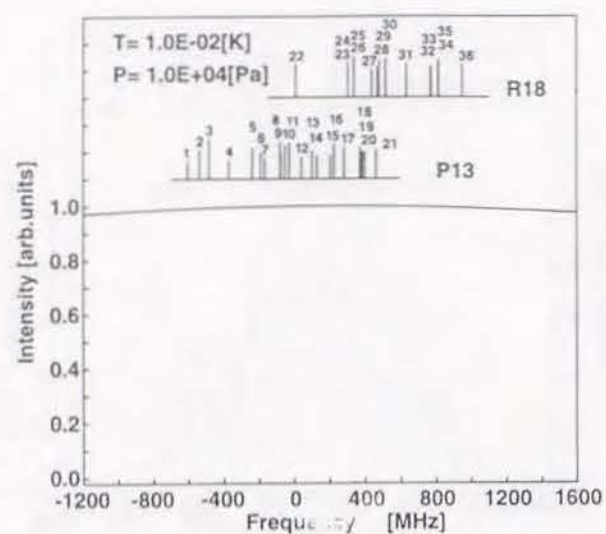


(c) $T=1$ [K]の場合

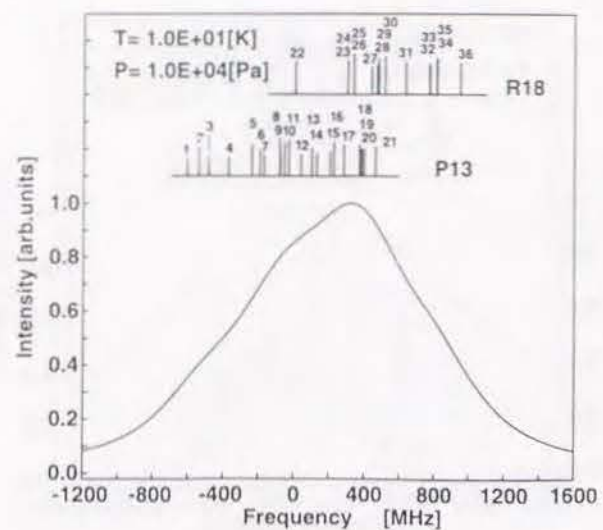


(f) $T=300$ [K]の場合

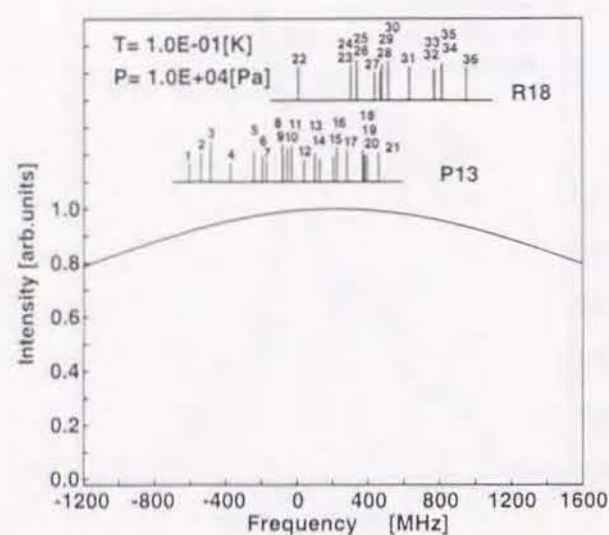
図4.17 超微細構造スペクトル計算結果 ($P=1000$ [Pa]の場合)



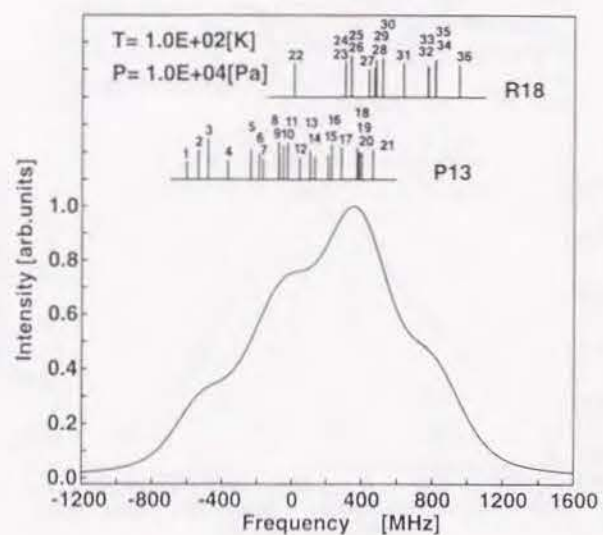
(a) $T=0.01$ [K]の場合



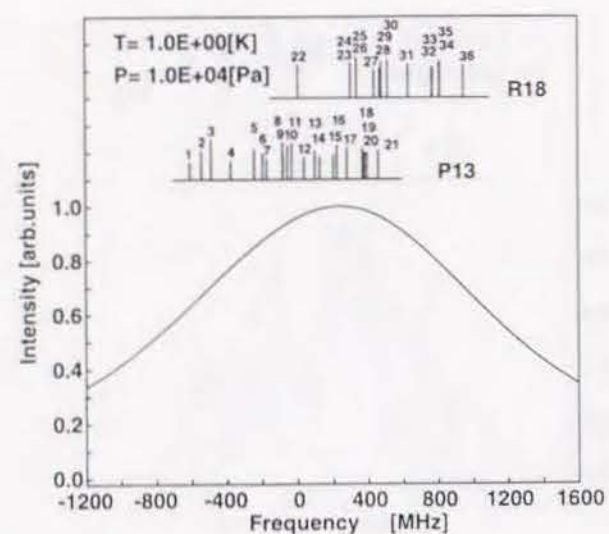
(d) $T=10$ [K]の場合



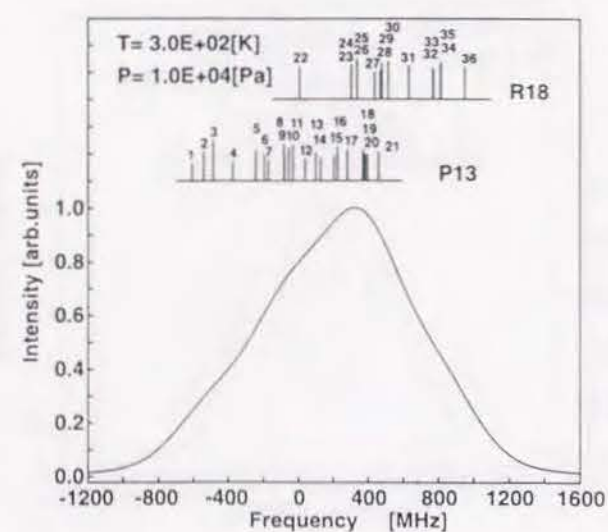
(b) $T=0.1$ [K]の場合



(e) $T=100$ [K]の場合

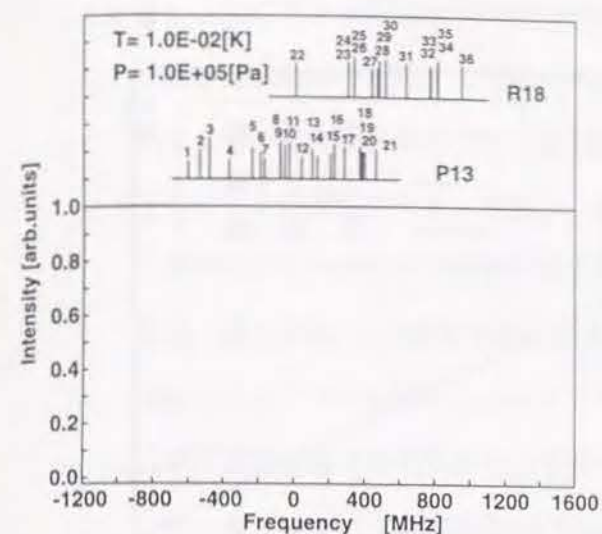


(c) $T=1$ [K]の場合

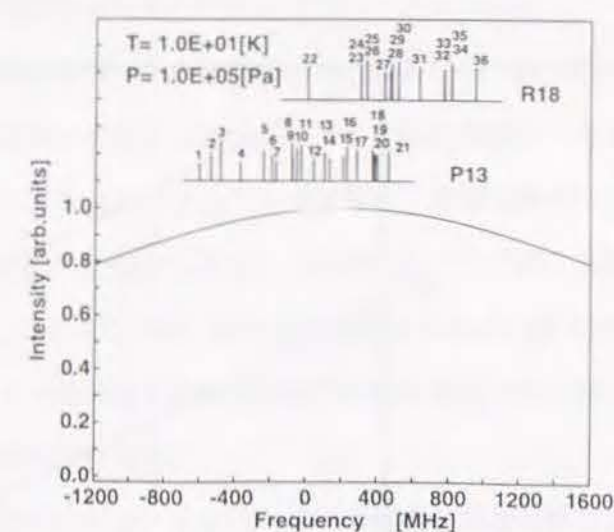


(f) $T=300$ [K]の場合

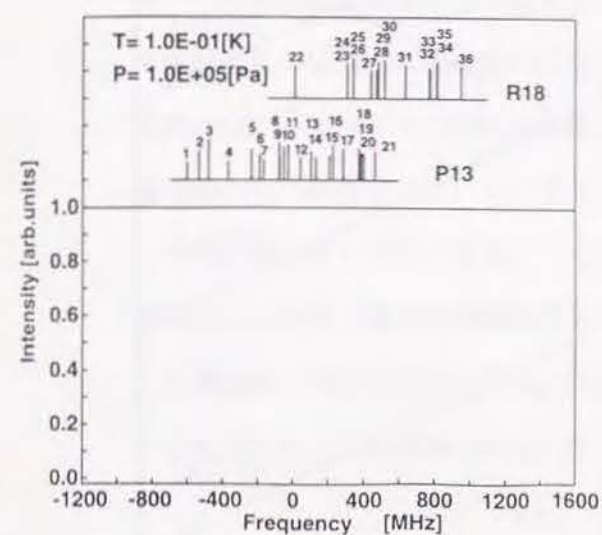
図4.18 超微細構造スペクトル計算結果 ($P=10000$ [Pa]の場合)



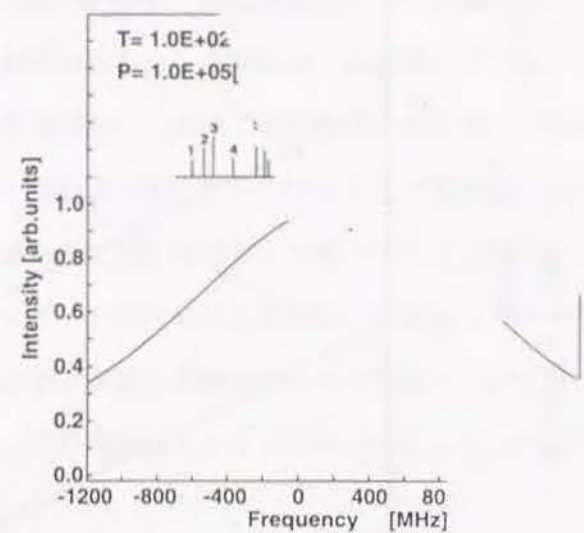
(a) $T=0.01$ [K]の場合



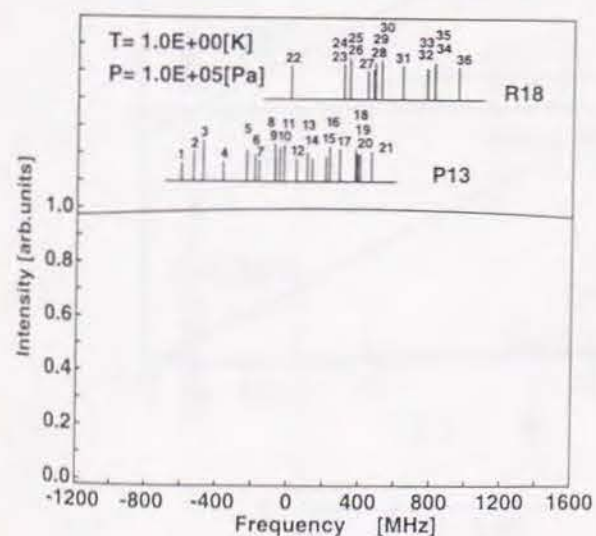
(d) $T=10$ [K]の場合



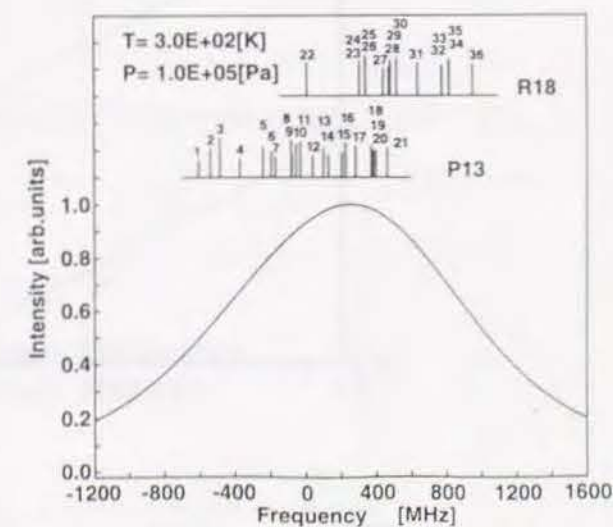
(b) $T=0.1$ [K]の場合



(e) $T=100$ [K]の場合



(c) $T=1$ [K]の場合



(f) $T=300$ [K]の場合

図4.19 超微細構造スペクトル計算結果 ($P=100000$ [Pa]の場合)

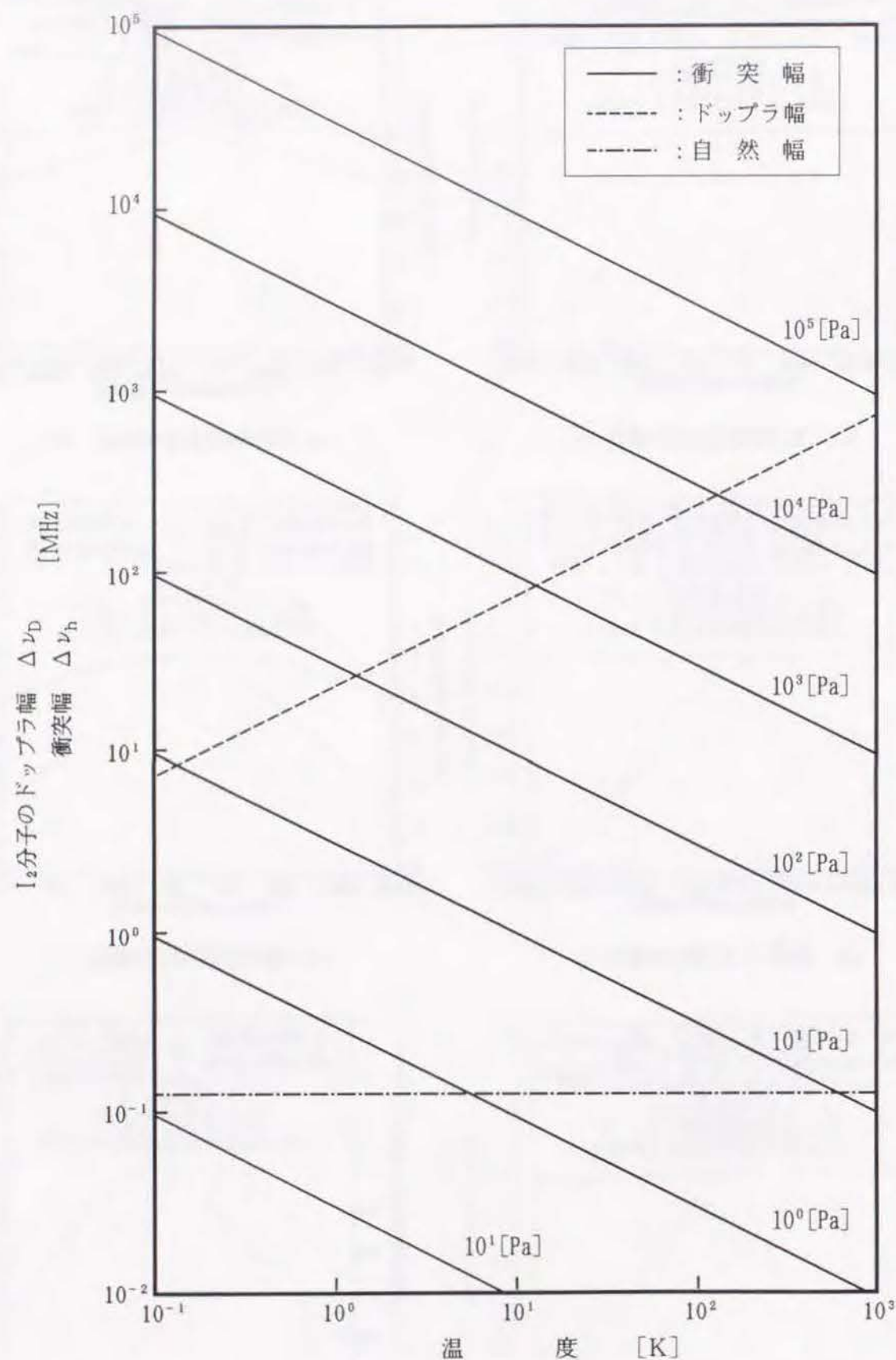


図4.20 ドップラ幅及び衝突幅と温度の関係

4.3.4 スペクトル形状のみかけのピーク周波数シフト

図4.11(b)と(c)を比較して注目すべき点は、スペクトル強度が最大となるピーク周波数が異なっている点である。これは超微細構造のスペクトル形状がなまるために生ずる「みかけのピーク周波数シフト」であり、流速によるドップラシフトではない。並進温度や圧力の違いによりスペクトル形状が変化するために、見かけのピーク周波数シフトが起こる現象は、過去の I_2 -LIF研究では言及されたことはないが、波長参照用標準セル中の静止気体の示すスペクトル線からのドップラシフトを利用する流速測定では誤差要因となり易いので、注意を要する点であり、今後の研究が待たれる。

次の第5章で述べる実験での代表的圧力下の(13, 0) R13-P18の場合の並進温度とピーク周波数位置の関係を図4.21に示す。温度とみかけのピーク周波数シフトの関係をみると、それは80 K程度で極値を有するという傾向があり、低温域ではピーク周波数シフトは高温域に比べ相対的に温度変化に対して敏感である。この理由は、低温域ではドップラ幅が狭いので、スペクトル形状は超微細構造を反映したタイプIの形状になり易く、超微細構造線の互いの重なり合いによるスペクトル形状の変化がみかけのピーク周波数変化となって現われやすいからである。一方、高温域では図4.11(c)のようなブロードなスペクトル形状となるので、個々の超微細構造はスペクトル形状に対し支配的とはならずみかけのピーク周波数シフトが生じにくい。流速測定値の誤差との関連性について述べておくと、図4.2に示したように流速 100 m/s に対し、約172 MHz のドップラシフトが生じる。本研究で

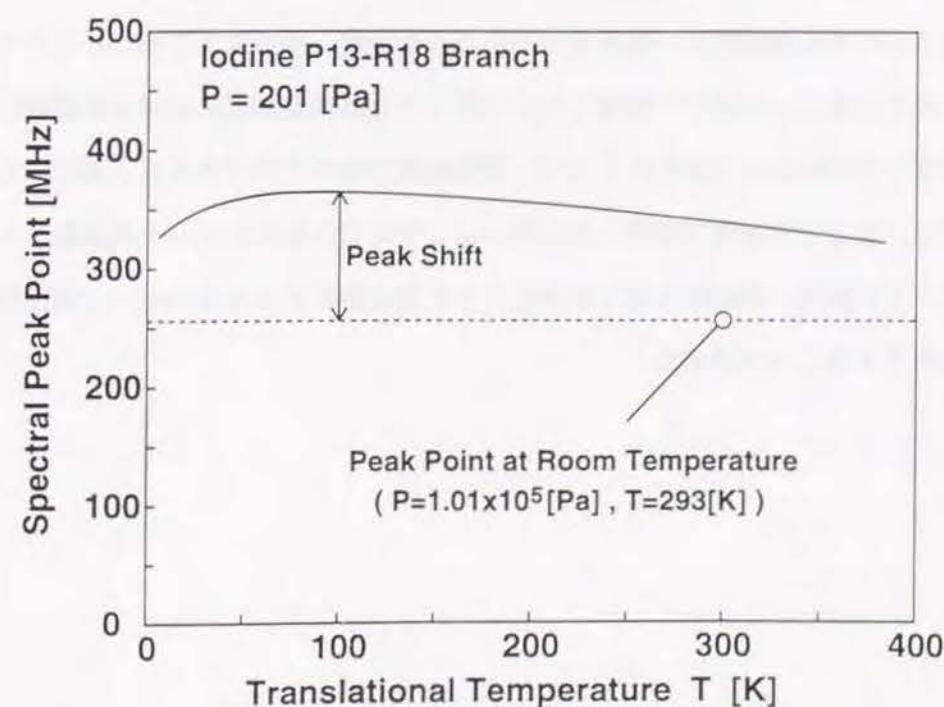


図4.21 I_2 回転スペクトルのみかけのピーク周波数シフト

対象とする自由噴流の並進温度域300K~3Kの範囲で、図4.21に見られるようにみかけ上のピーク周波数が最大約109MHz+側にシフトされる。すなわち、この周波数シフト込みで流速の測定をすると、流速を最大63m/s遅い側に評価する可能性がある事になる。みかけのピーク周波数シフトは、圧力によって異なった値をとるので、このシフト量を本章のスペクトル形状理論から実験条件毎に予測することが必要である。

4.4 結 言

希薄気体流れの流速測定への応用を目的としたよう素分子(I_2)を用いたレーザ誘起蛍光法(I_2 -LIF)に対するスペクトル形状の理論計算を行い下記の結論を得た。

- (1) $B^3\Pi_{ou}^+ \longleftrightarrow X^1\Sigma_g^+$ バンドを使用した流速測定に適する回転スペクトル線の選定方法として、本論文第2章で検討した回転スペクトルシミュレーション手法が応用できることが明らかとなった。また、この手法を適用した結果、(13, 0)バンドのP13-R18ブランチが孤立していることが理論的に確認され、超微細構造スペクトル形状に着目した測定対象の回転スペクトル線として適切であるとの結論を得た。
- (2) I_2 の回転スペクトル及び核スピンの起因する超微細構造の一般的計算手法を確立した。
この手法を用いて、(13, 0)バンドのP13-R18ブランチに対して、圧力、温度の広い領域内での超微細構造を考慮した回転スペクトル線の形状変化を予測した。その結果、超微細構造を含むスペクトル形状は大きく3つのパターンに分類できることが明らかとなり、また、それぞれのパターンが生じる圧力、温度条件を明らかにした。
- (3) スペクトルの中心周波数は、速度ゼロのもとでも温度、圧力によりみかけのピーク周波数シフトが生じることを初めて指摘した。このシフトは流速測定における誤差要因であり、それは温度・圧力によって変化するので、各実験条件毎にその大きさを正確に知ることが重要である。そこで本研究で開発した手法によってそのみかけのピーク周波数シフト量を予測した。その結果、次の第5章で流速をより正確に測定するためのピーク周波数シフト補正法を確立することが出来た。

第 5 章

I_2 -LIFによる流速測定実験

5.1 緒 言

従来の確立された非接触流速測定技術のひとつとして、レーザ光の干渉を利用したレーザドップラー流速計(LDV)があり、様々な分野への応用がなされ多くの成果を上げている。この手法はその原理上、流れ場中に光散乱体としてミクロンオーダの微粒子を混入しなければならないが、LDVを用いて、気体の流速測定を行う場合、大気圧あるいは数百Torrの圧力であれば、光散乱体は流れ場に追従し流速測定は可能である。しかし、圧力が低下して数Torr以下になると、光散乱体は流れ場に追従しなくなり、LDVによる流速測定は不可能となる。そこで本研究では、LDV等が使用できなくなる低圧力場における流れ、すなわち希薄気体流れ場の速度計測技術の確立の必要性から、希薄気体流中においても非接触で速度を測定できる手法として I_2 -LIFに着目して研究を行った。

前の第4章において、 I_2 -LIF、特に回転スペクトル線に含まれる超微細構造を考慮しながら、 I_2 回転スペクトル線のピークの波長シフト量を読み取る I_2 -LIF手法について理論的に考察した。その結果、 I_2 の回転スペクトル線は圧力、温度によってその様相が様々に変化することがわかり、また、回転スペクトル線のピーク周波数のドップラシフトから、速度を決定する際には前の第4章で理論的に指摘したみかけのピーク周波数シフト量を補正する必要があるという流速測定に関する重要な知見を得た。

本章では、最初に第4章のスペクトル理論を実験的に確認し、かつ、超音速自由噴流の流速測定を実際に行い、超微細構造を考慮してスペクトルピークの周波数シフト量を読み取る本研究独自の手法の妥当性を検証し、 I_2 -LIF速度測定法の基礎を確立する。ついで、実証したスペクトル形状理論に準拠して、スペクトルピーク周波数シフト量を求め、それから軸対称自由噴流の中心軸上の速度分布を測定する。その結果より、 I_2 -LIFの希薄気体流れ流速への適用性を実証する。最後に、実証した I_2 -LIF法を、工学的な応用例として、本研究の本来の応用目的である真空シールロール間流れに適用し、工業上においても I_2 -LIF法が有用であることを示す。

5.2 自由噴流の一般的事項

自由噴流は、流れが連続体として見なせる場合には、図5.1に示す構造を持つ^[J5]。気体は、低圧部で急激に膨張して圧力は低下するが、周囲が有限の圧力であるため、たる形衝撃波(barrel shock)やマッハディスク(Mach disk)と呼ばれる衝撃波を形成して、周囲の圧力に回復する。流れ場中の流速分布や温度分布は、理想気体については、その構造を数値計算により求めることができる。計算結果の一例として、流れの軸方向の温度分布と速度分布をそれぞれ図5.2、図5.3に示す^[J5]。いずれも、マッハディスクの位置を境に、急激に変化する。

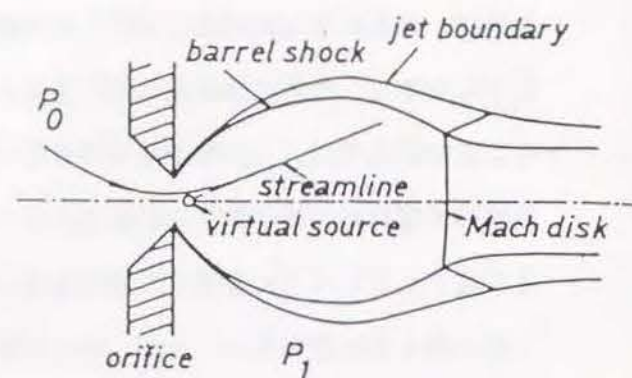


図5.1 自由噴流の構造^[J5]

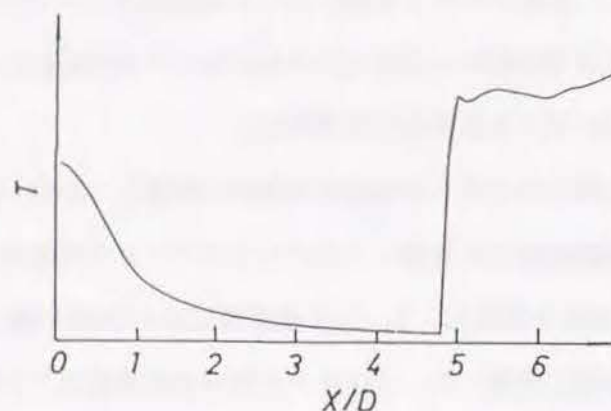


図5.2 自由噴流軸上の温度分布例^[J5]

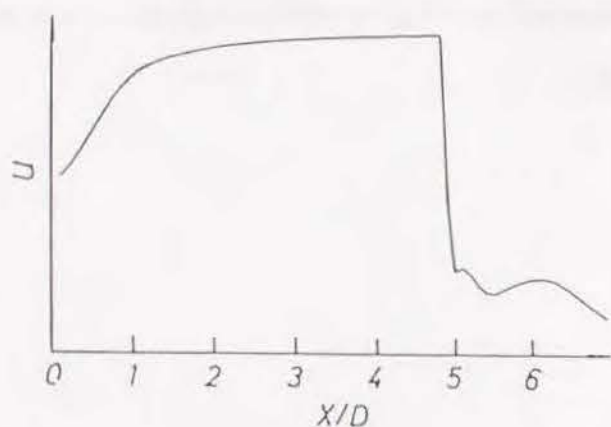


図5.3 自由噴流軸上の速度分布例^[J5]

- 比熱比: $\gamma = 5/3$
- 圧力比 $P_0/P_1 = 50$
- D: オリフィスの直径
- X: ノズル先端からの距離

- 比熱比: $\gamma = 5/3$
- 圧力比 $P_0/P_1 = 50$
- D: オリフィスの直径
- X: ノズル先端からの距離

Ashkenasらの実験^[G5]により自由噴流軸上のMach数分布は以下の式で与えられる。

$$M = A \left(\frac{x - x_0}{d^*} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma+1}} - \frac{1}{2} \left(\frac{\gamma+1}{\gamma-1} \right) / A \left(\frac{x - x_0}{d^*} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma+1}} \quad (5.1)$$

上式中の定数 x_0, A は表5.1に示される。

連続流と等エントロピー流の仮定を用いると、自由噴流軸上の圧力、温度、音速は次式で与えられる^[P2]。

$$\frac{P}{P_0} = \left[1 + \frac{\gamma-1}{2} M^2 \right]^{-\frac{\gamma}{\gamma-1}} \quad (5.2)$$

$$\frac{T}{T_0} = \left[1 + \frac{\gamma-1}{2} M^2 \right]^{-1} \quad (5.3)$$

$$\frac{a}{a_0} = \left[1 + \frac{\gamma-1}{2} M^2 \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (5.4)$$

自由噴流軸上の速度は式(5.1)(5.3)より、

$$u = aM \quad (5.5)$$

で計算することが出来る。Ashkenasらの実験^[G5]によれば、自由噴流中におけるマッハ・ディスクの位置は次式で与えられる。

$$\frac{x_M}{d^*} = 0.67 \left(\frac{P_0}{P_1} \right)^{\frac{1}{\gamma}} \quad (5.6)$$

また、マッハ・ディスク前（添字a）と後（添字b）におけるマッハ数、圧力、温度、音速の関係はRankine-Hugoniotの関係で与えられる。

$$\frac{P_b}{P_a} = \frac{2\gamma}{\gamma+1} M_a^2 - \frac{\gamma-1}{\gamma+1} \quad (5.7)$$

$$\frac{T_b}{T_a} = \left(\frac{a_b}{a_a} \right)^2 = \left[1 + \frac{2\gamma}{\gamma+1} (M_a^2 - 1) \right] \left[1 + \frac{\gamma-1}{\gamma+1} (M_a^2 - 1) \right] M_a^{-2} \quad (5.8)$$

表5.1 Ashkenasらの式における定数^[G5]

γ	x_0/d^*	A
1.67	0.075	3.26
1.40	0.40	3.65
1.2857	0.85	3.96

5.3 I_2 -LIFによる流れの可視化

I_2 -LIFは希薄流の可視化法としても有用な手法であり、研究が進められて来た [J1, J2, J3, J5, J6, J7, J8]。本節では、次5.4節において行う I_2 -LIFによる流速測定の予備検討として、流速測定対象の自由噴流が図5.1で示した適正な噴流状態になっているか、例えば、

- (1) 噴流が正しく軸対称になっているか
- (2) マッハ・ディスク衝撃波が正常か

を見ておくために、 I_2 -LIFによって自由噴流の可視化を行った結果を述べる。

可視化文献[J6]の実験装置と同様に構成した。図5.4に可視化用実験装置を、また図5.5に使用した自由噴流ノズルを示す。孔径は $\phi 0.44\text{mm}$ である。図5.6にノズルスロート部の断面形状測定結果を示す。

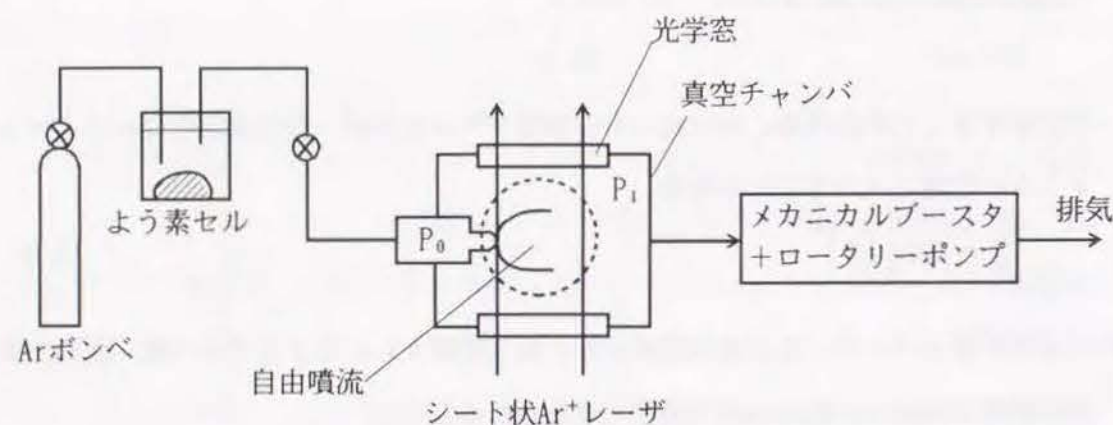


図5.4 自由噴流可視化用実験装置

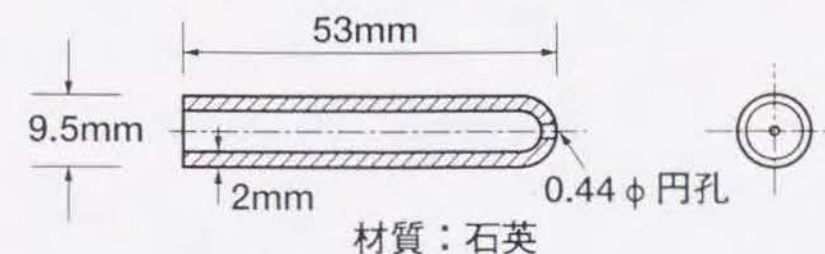


図5.5 自由噴流ノズル

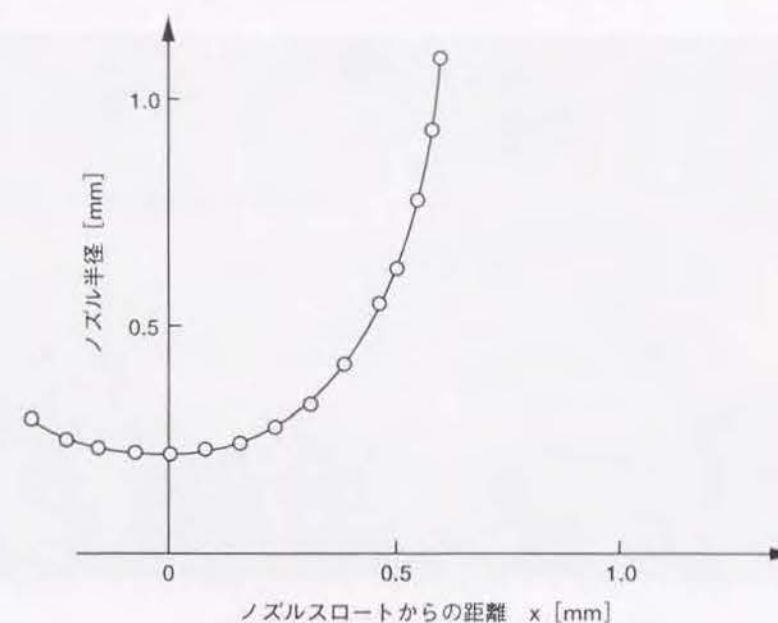


図5.6 ノズル断面形状

図5.7に圧力比 $P_0/P_1 = 503.3$ 、及び1089の場合の自由噴流可視化実験結果を示す。

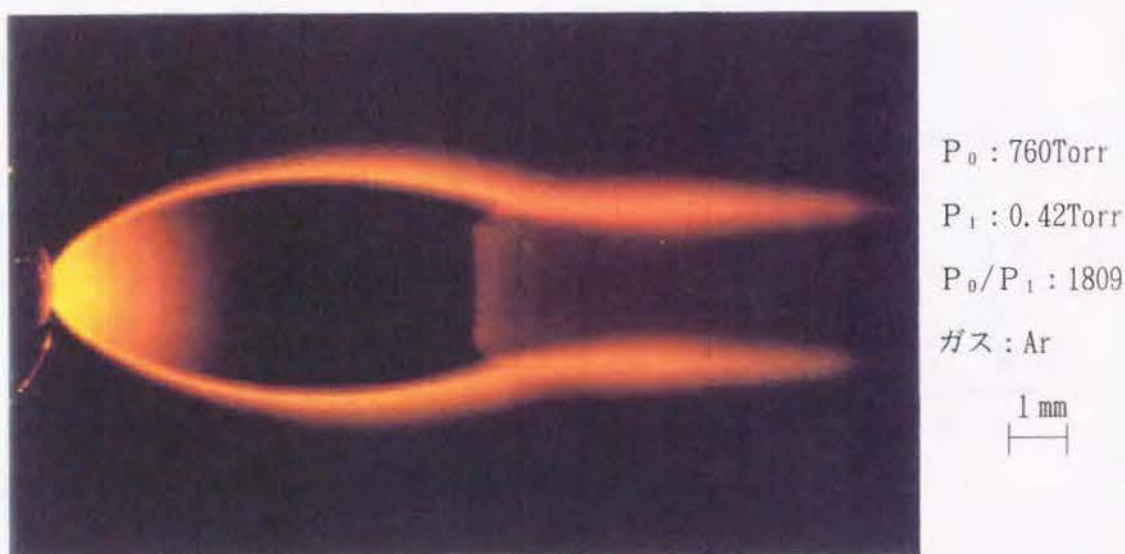
図5.7(a)及び(b)いずれの場合にも自由噴流は軸対称となっており、ノズルが適正に対称に製作されていることがわかる。ノズル近傍でよう素の蛍光がオレンジ色で強くみえるのは、ノズル出口近傍の I_2 数密度が高いためである。

図5.8にマッハ・ディスク位置の測定結果をAshkenasらの式(5.6)と比較して示す。

本実験結果とAshkenasらの実験式はよく一致しており、本研究で用いるノズルで標準的な自由噴流が作れること及び、本可視化手法が妥当であることがわかった。



(a) 圧力比 $P_0/P_1=503.3$ の場合



(b) 圧力比 $P_0/P_1=1809$ の場合

図5.7 自由噴流可視化結果

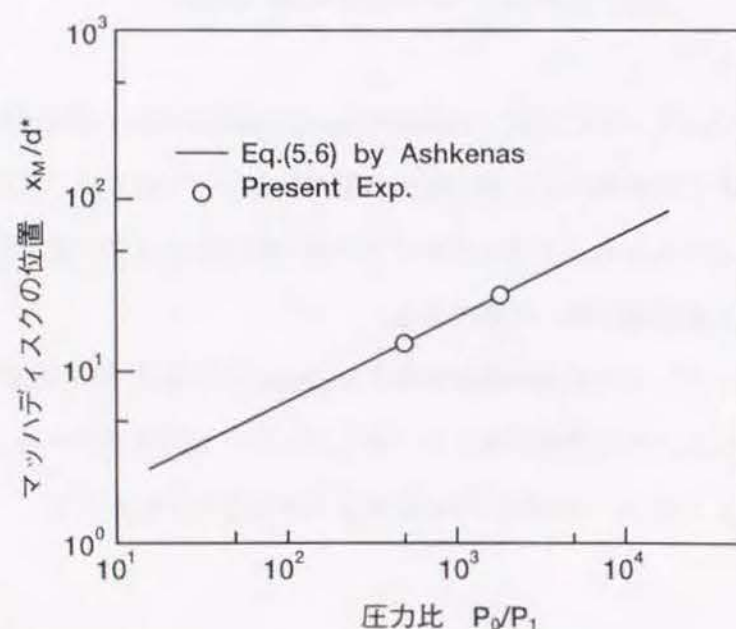


図5.8 マッハ・ディスク位置の測定結果

5.4 I_2 -LIFによる自由噴流流速測定

図5.9に超音速自由噴流中の流速測定で用いた実験装置を示す。よう素分子の回転スペクトルの超微細構造を検出するために、線幅が500kHzに狭帯域化されたリングダイレーザ（コヒーレント社製669-21）を用いた。レーザ光をレンズで直径300 μm のピンホールに集光し、そこから出射したレーザ光をドップラシフト量が最大となるように長焦点距離のレンズでノズルスロート部 ($d^*=0.44\text{mm}$) に噴流軸下流方向から入射させて、ノズル表面上でレーザ光を散乱させることなく集光する。よどみ点圧力 $P_0 = 10^5\text{ Pa}$ 、よどみ点温度 $T_0 = 293\text{ K}$ のアルゴンガス(Ar)をノズルを通して雰囲気圧力 $P_1 = 201\text{ Pa}$ へ噴出させ、その中に、微量のよう素分子を混入する。よう素セルは室温雰囲気を用い、よう素の蒸気圧は 293 K で 40 Pa ^[10]、Arと I_2 の混合ガス中でよう素の分圧は0.04%である。

蛍光検出のために、焦点距離100mmの分光器（日本分光社CT-10, f値=3）を用い、分光器のグレーティングをゼロ次に設定した。分光器の入射スリット前に置かれた色ガラスフィルター(R62)を用いて、入射レーザ光より長波長の蛍光のみを光電子増倍管で選択検出する。集光レンズの焦点距離は100mmで、集光レンズと分光器の間に $\phi 20$ のアパーチャを設置した。

図5.10に自由噴流中の流速測定で得られたスペクトル形状の生データによるドップラシフトを示す。この図の上段のスペクトルは、レーザ光の波長をスキャンした際にモードホップと呼ばれる波長の飛びが生じていないことを確認するためのモニターである。中段のスペクトルは、リングダイレーザにより励起されたよう素分子からの蛍光の強度変化を表しており、よう素分子の吸収ピークに対応している。下段のスペクトルは、参照セル中のよう素分子からの蛍光強度変化であり、流速ゼロの吸収ピークを表している。これら3つの信号は、レーザの波長スキャンに伴い同時に計測されたものである。

中段と下段のスペクトルを比較すると、中段のスペクトルのピークが下段のスペクトルのピークよりも低周波数側（長波長側）にシフトしており、さらに、中段のスペクトルは下段のスペクトルには見られない4山パターンの超微細構造を示していることが解る。この周波数シフトは、よう素分子のドップラー効果により生じたものであり、このシフト量から式(4.4)を用い流速 u を求めることができる。

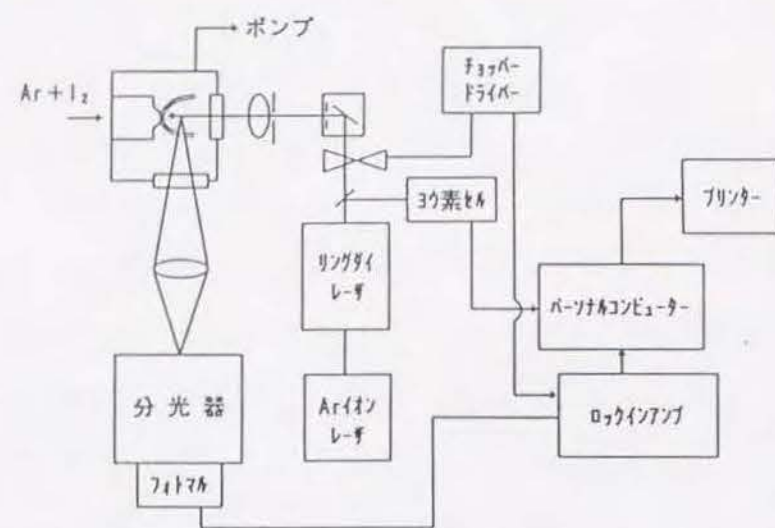


図5.9 自由噴流の流速測定装置

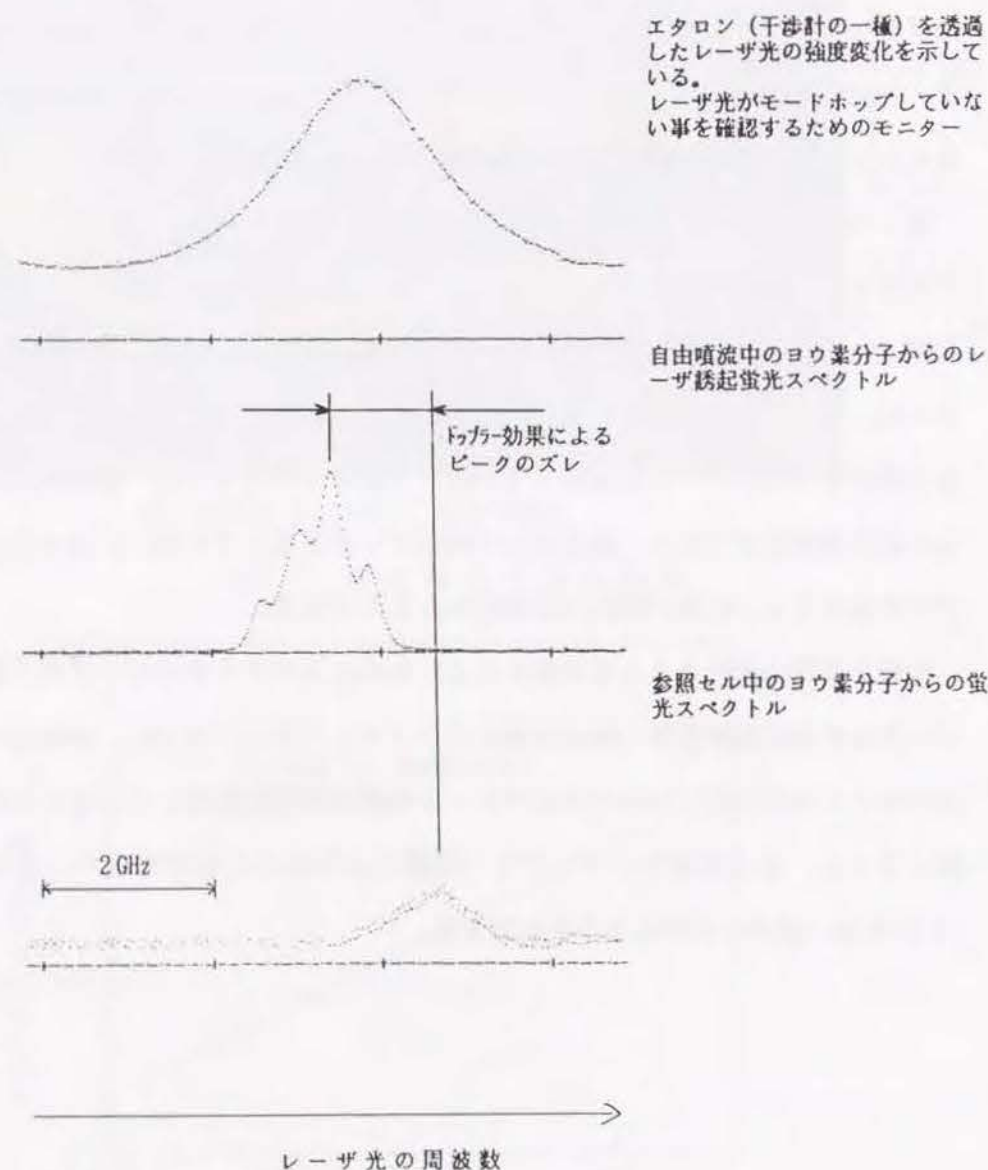
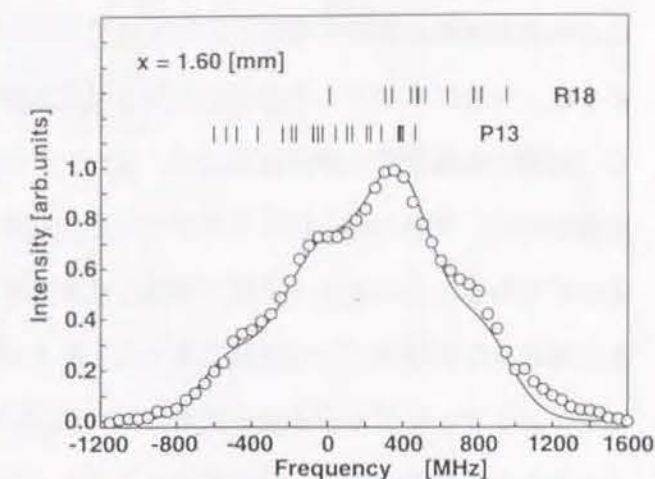


図5.10 流速測定で得られるドップラシフト

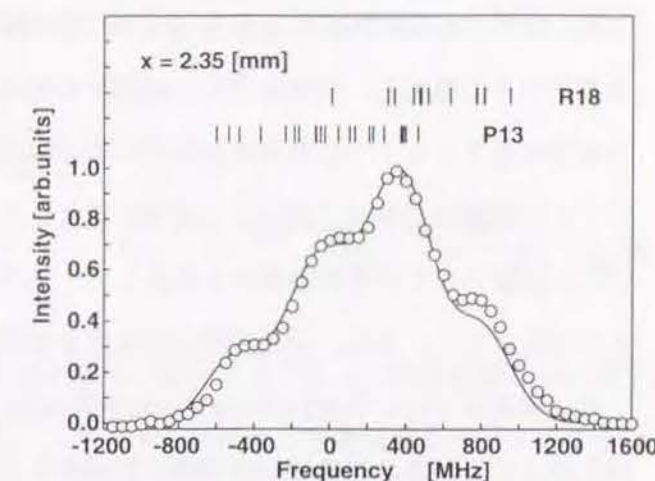
図5.11(a)~(c)にAr-I₂超音速自由噴流の対称軸上におけるI₂スペクトル形状の測定結果を示す。図5.11には測定されたスペクトル形状に対応する理論スペクトル形状を示す。

図5.11ではノズルスロート部から下流へと並進温度が低下するにつれてスペクトル形状が1山タイプから4山タイプへと移向していく様子が明確に現れている。理論スペクトル形状は実験結果をほぼ正確に予測しており第4章で説明したスペクトル形状理論が妥当であることがわかる。

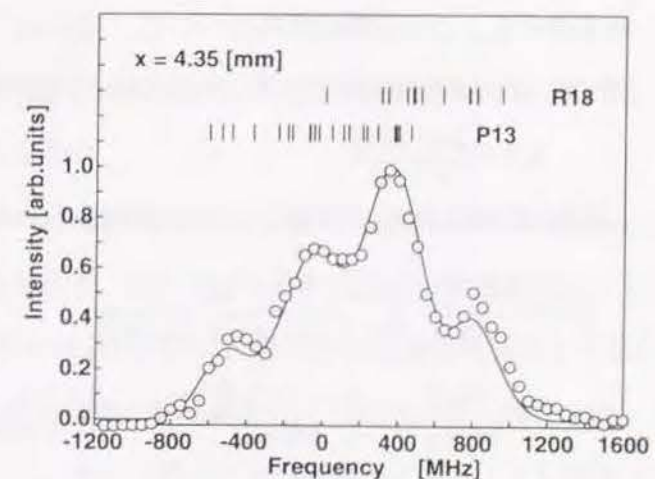
スペクトル形状理論の妥当性を確認することが出来たので、次にスペクトル形状理論から第4章で導かれたみかけのピーク周波数シフトの速度測定結果への影響を補正するものとする。



(a) $x = 1.6\text{mm}$ におけるスペクトル形状



(b) $x = 2.35\text{mm}$ におけるスペクトル形状



(c) $x = 4.35\text{mm}$ におけるスペクトル形状

図5.11 I₂スペクトル形状測定結果

ここでは、この章の本来の課題ではないが、第2章、第3章との関連から、まず I_2 -LIFにより並進温度を測定することの可能性について検討する。式(4.9)(4.10)(4.11)に示したように、一般にスペクトル形状は圧力と並進温度に支配されるので、スペクトル形状のみから一意的に並進温度を決定出来ない。しかし、圧力が低く衝突幅 $\Delta\nu_h$ が無視しうる場合には、原理的には、実験で得られたスペクトル形状(図5.11)から逆に並進温度を求めることが出来るはずである。この点を本研究で採用した測定系(図5.9)で試みたが、残念ながら十分な精度の並進温度を得ることは困難であった。例えば図5.11(c)のスペクトル形状を式(4.9)(4.10)にてフィッティングすると並進温度は $T=115\text{K}$ と求まり、式(5.1)(5.2)による並進温度 $T=4\text{K}$ とかなり差がある。並進温度をスペクトルのドップラ幅から正しく求めることが困難である理由は、 $\text{Ar}-I_2$ 自由噴流自体の気体力学的な理由、例えば、(1)平行並進温度(本実験で観測されるドップラ幅に対応する量)と垂直並進温度との非平衡現象が存在する^[66]、

(2)軽い Ar 気体流中に含まれる重い I_2 分子には追従遅れから生じる並進温度凍結現象が発生する^[67]などの理由と、分光測定法に起因する理由、例えば、(1)Levingerら^[12]が指摘するように分光器スリットへの集光角に起因する分解能限界が存在する、(2) I_2 分子の蛍光寿命が長いことに起因する噴流上流からの蛍光の流れ込みが存在する、などが考えられる。文献[G6, G7]に記載されている実験値から判断して、気体力学的理由によって並進温度が定まらないとは考えにくく、また、分光測定法に起因する理由のうちで、後者の蛍光の流れ込みについては、本実験で用いる波長581nmでは蛍光寿命は $1.18\mu\text{s}$ ^[H3]であるから、噴流流速500m/sに対し約0.6mm上流の蛍光情報を同時に計測することになるものの、並進温度測定誤差に対する影響はさほど大きくないと判断される。したがって、ここでは並進温度とスペクトルのドップラ幅が対応していない理由は、スリット集光角に起因する分解能限界であると推定し検討を進める。この分解能限界について、Johnsonら^[M15]は噴流の流速 u に対する検出ドップラ幅 $2D$ と呼ぶ幅を、スリット集光角 θ 、及び、レーザ波長 ν に対し、

$$2D = \frac{2u\nu}{c} \frac{\sin\theta}{2} \quad (5.8)$$

と見積り、検出ドップラ幅によって自然幅(ローレンツ型関数)が

$$f(\nu) = \frac{S(\frac{\Delta\nu}{2})}{2\pi D} \int_{\nu_0-D}^{\nu_0+D} \frac{d\xi}{(\nu-\xi)^2 + (\Delta\nu/2)^2} \\ = \frac{S}{2\pi D} \left[\tan^{-1} \left(\frac{\nu-\nu_0+D}{(\Delta\nu/2)} \right) - \tan^{-1} \left(\frac{\nu-\nu_0-D}{(\Delta\nu/2)} \right) \right] \quad (5.9)$$

と観測されると考えた。式(5.9)は $D \rightarrow 0$ のときローレンツ形関数に一致する。式(5.9)を用いて検出ドップラ幅の効果を式(4.9)に導入すると次式となる。

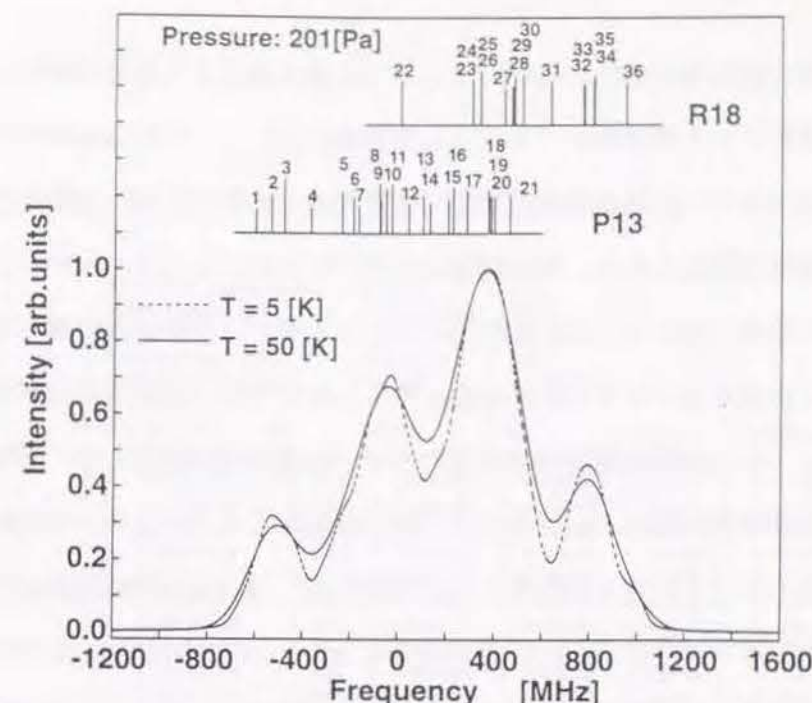


図5.12 集光角の影響を考慮したスペクトル形状

$$f_i(\nu) = \frac{S_i}{\pi\nu_{oi}} \left(\frac{mc^2}{2\pi kT} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-\frac{mc^2(\nu' - \nu_{oi})^2}{2kT\nu_{oi}^2} \right] \\ \times \frac{1}{2D} \left[\tan^{-1} \frac{(\nu - \nu_{oi}) - (\nu' - \nu_{oi}) + D}{(\Delta\nu/2)} - \tan^{-1} \frac{(\nu - \nu_{oi}) - (\nu' - \nu_{oi}) - D}{(\Delta\nu/2)} \right] d\nu' \quad (5.10)$$

式(5.10)を用いて $\theta = 5^\circ$ に対し、5Kと50Kの場合のスペクトル形状を図5.12に示す。温度の違いの割には両者の相違は少なく、スペクトル線幅から並進温度を決定することが容易でないことがわかる。したがって本研究では温度測定については第2章、第3章のように O_2 -LIPFによる回転・振動温度の測定について検討した。

5.4 流速測定結果

流速測定では、スペクトルのピーク周波数のドップラシフト量を測定するので、スペクトル形状の有する線幅は大きな問題にはならない。

図5.13に第4章3.3節で求めたみかけのピーク周波数シフトによる誤差を補正した $\text{Ar}-I_2$ 自由噴流の中心軸上の速度分布測定結果を示す。図5.13ではみかけのピーク周波数シフト $\pm 55\text{MHz}$ をエラーバーとして表示した。図中には式(5.1)~(5.8)による流速を実線で示しており、マッハディスク前の領域で実験値はこれらの式と良い一致を見せている。表5.2は、これらの式から求められたに計算値を示した。マッハディスクの位置 x_M についても式(5.6)で計算される値 $x_M = 6.6\text{mm}$ と非常に良い一致を示し、本計測手法によって流速を測定できる確証が得られた。

ここで、流速の測定精度向上について考える。第4章4.3.4節で指摘した並進温度差から生ずるみかけのピーク周波数シフトによる測定誤差があり、それは低速流れ場や翼列内流れなどでは無視できず、流速測定精度を厳しく要求される場合にはこの誤差の補正による測定精度向上が重要な課題となる。測定精度向上のためには、もちろんみかけのピーク周波数シフトを正確に予測し補正するための回転スペクトルのピーク周波数の読み取り精度向上が必要である。その他にはドップラ幅の影響をキャンセルできる非線型高分解能分光^[12, M2, M3]を用いると、 I_2 分子の超微細構造が現れやすい性質を逆に利用して、回転スペクトルではなく特定の超微細構造線のドップラシフト量を計測することにより、その測定精度を自然幅レベルまで高めることが考えられる。 I_2 の場合には、最小自然幅が励起波長504nm域において0.02MHz程度^[H3]と考えると、原理的には0.01m/sまでの分解能は可能であり、自然幅レベルの分光法^[M2]の適用等も考えられるが、これらについては今後の検討課題である。

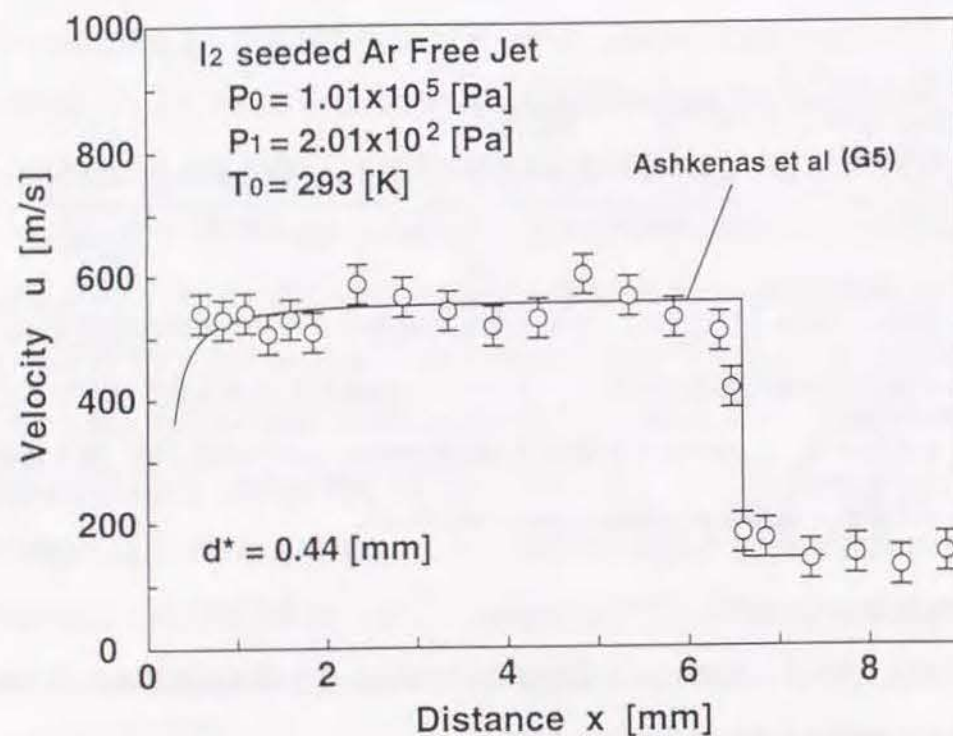


図5.13 自由噴流軸上の流速分布測定結果

表5.2 式(5.1)～(5.8)を用いて計算した自由噴流中心軸上の値

Specific Heat Ratio	1.67	[-]
Stag. Press P0	1.000E+05	[Pa]
Stag. Temp T0	300.00	[degK]
Nozzle Dia. D*	0.44E-03	[m]
Molecular Weight	39.95	[g/mol]

(X-X0)/D	X	Ma	Press.	Temp.	No.Dens.	DynaPres
[-]	[m]	[-]	[mbar]	[degK]	[1/cm3]	[Pa]
0.2	1.210E-04	-0.688	6.930E+02	2.590E+02	1.939E+19	2.738E+04
0.4	2.090E-04	0.635	7.291E+02	2.643E+02	1.999E+19	2.456E+04
0.6	2.970E-04	1.454	2.631E+02	1.756E+02	1.085E+19	4.647E+04
0.8	3.850E-04	2.098	1.046E+02	1.213E+02	6.248E+18	3.842E+04
1.0	4.730E-04	2.649	4.911E+01	8.954E+01	3.973E+18	2.877E+04
1.2	5.610E-04	3.143	2.624E+01	6.963E+01	2.730E+18	2.164E+04
1.4	6.490E-04	3.597	1.542E+01	5.625E+01	1.985E+18	1.665E+04
1.6	7.370E-04	4.021	9.728E+00	4.676E+01	1.507E+18	1.313E+04
1.8	8.250E-04	4.421	6.486E+00	3.975E+01	1.182E+18	1.059E+04
2.0	9.130E-04	4.803	4.517E+00	3.438E+01	9.519E+17	8.700E+03
2.2	1.001E-03	5.169	3.258E+00	3.015E+01	7.828E+17	7.268E+03
2.4	1.089E-03	5.521	2.420E+00	2.676E+01	6.550E+17	6.158E+03
2.6	1.177E-03	5.861	1.841E+00	2.398E+01	5.561E+17	5.282E+03
2.8	1.265E-03	6.192	1.430E+00	2.167E+01	4.781E+17	4.578E+03
3.0	1.353E-03	6.513	1.131E+00	1.972E+01	4.154E+17	4.006E+03
3.2	1.441E-03	6.826	9.081E-01	1.806E+01	3.642E+17	3.534E+03
3.4	1.529E-03	7.132	7.392E-01	1.663E+01	3.220E+17	3.140E+03
3.6	1.617E-03	7.431	6.089E-01	1.539E+01	2.867E+17	2.808E+03
3.8	1.705E-03	7.724	5.070E-01	1.429E+01	2.569E+17	2.526E+03
4.0	1.793E-03	8.011	4.262E-01	1.333E+01	2.316E+17	2.284E+03
4.2	1.881E-03	8.293	3.614E-01	1.248E+01	2.098E+17	2.075E+03
4.4	1.969E-03	8.570	3.088E-01	1.172E+01	1.909E+17	1.894E+03
4.6	2.057E-03	8.843	2.657E-01	1.103E+01	1.745E+17	1.735E+03
4.8	2.145E-03	9.111	2.302E-01	1.041E+01	1.601E+17	1.595E+03
5.0	2.233E-03	9.376	2.005E-01	9.853E+00	1.474E+17	1.472E+03
5.2	2.321E-03	9.636	1.757E-01	9.344E+00	1.362E+17	1.362E+03
5.4	2.409E-03	9.893	1.547E-01	8.879E+00	1.262E+17	1.264E+03
5.6	2.497E-03	10.147	1.369E-01	8.453E+00	1.173E+17	1.177E+03
5.8	2.585E-03	10.397	1.216E-01	8.061E+00	1.093E+17	1.098E+03
6.0	2.673E-03	10.645	1.085E-01	7.700E+00	1.021E+17	1.026E+03
6.2	2.761E-03	10.889	9.714E-02	7.367E+00	9.553E+16	9.618E+02
6.4	2.849E-03	11.131	8.730E-02	7.058E+00	8.961E+16	9.032E+02
6.6	2.937E-03	11.370	7.871E-02	6.771E+00	8.422E+16	8.497E+02
6.8	3.025E-03	11.607	7.119E-02	6.503E+00	7.931E+16	8.009E+02
7.0	3.113E-03	11.841	6.458E-02	6.254E+00	7.481E+16	7.561E+02
7.2	3.201E-03	12.073	5.875E-02	6.021E+00	7.068E+16	7.150E+02
7.4	3.289E-03	12.303	5.358E-02	5.802E+00	6.689E+16	6.771E+02
7.6	3.377E-03	12.530	4.899E-02	5.597E+00	6.340E+16	6.422E+02
7.8	3.465E-03	12.755	4.489E-02	5.405E+00	6.017E+16	6.099E+02
8.0	3.553E-03	12.979	4.123E-02	5.224E+00	5.718E+16	5.800E+02
8.2	3.641E-03	13.200	3.795E-02	5.053E+00	5.441E+16	5.522E+02
8.4	3.729E-03	13.420	3.500E-02	4.891E+00	5.184E+16	5.264E+02
8.6	3.817E-03	13.638	3.234E-02	4.739E+00	4.944E+16	5.023E+02
8.8	3.905E-03	13.854	2.994E-02	4.594E+00	4.721E+16	4.799E+02
9.0	3.993E-03	14.069	2.777E-02	4.457E+00	4.513E+16	4.589E+02
9.2	4.081E-03	14.281	2.579E-02	4.327E+00	4.318E+16	4.393E+02
9.4	4.169E-03	14.493	2.400E-02	4.204E+00	4.135E+16	4.209E+02
9.6	4.257E-03	14.702	2.236E-02	4.086E+00	3.964E+16	4.036E+02
9.8	4.345E-03	14.911	2.087E-02	3.975E+00	3.803E+16	3.874E+02
10.0	4.433E-03	15.117	1.950E-02	3.868E+00	3.652E+16	3.721E+02
10.2	4.521E-03	15.323	1.825E-02	3.766E+00	3.509E+16	3.577E+02
10.4	4.609E-03	15.527	1.710E-02	3.669E+00	3.375E+16	3.441E+02
10.6	4.697E-03	15.730	1.604E-02	3.576E+00	3.249E+16	3.313E+02
10.8	4.785E-03	15.931	1.506E-02	3.488E+00	3.129E+16	3.192E+02
11.0	4.873E-03	16.131	1.416E-02	3.402E+00	3.016E+16	3.078E+02
11.2	4.961E-03	16.330	1.333E-02	3.321E+00	2.909E+16	2.969E+02
11.4	5.049E-03	16.528	1.257E-02	3.243E+00	2.807E+16	2.866E+02
11.6	5.137E-03	16.724	1.185E-02	3.168E+00	2.711E+16	2.769E+02
11.8	5.225E-03	16.919	1.119E-02	3.096E+00	2.619E+16	2.676E+02
12.0	5.313E-03	17.114	1.058E-02	3.027E+00	2.533E+16	2.588E+02

5.5 シールギャップ流速の理論

本節では、本研究本来の応用目的である真空シールロール間の流れの流速測定を行う準備として、シールギャップ流速の理論について説明する。

真空中においては密度が小さく、しかもほとんどの場合にシールギャップはmm以下であるから、シールギャップを通過する流れのレイノルズ数は小さい。従って粘性抵抗が無視できないので、シールギャップ部を通過する流れは等エントロピー流れとは見なせない。

以下ではこのような流れ場におけるシールギャップの通過流量を予測する簡易解析理論を導く。流体は圧縮性流体であるとして取扱い、すきま内部の流れに一次元エネルギー式を適用する。本章では、すきま部を流れる流量を記述するパラメータとして、工業上便利な次式で定義される流量係数を採用する。

$$\text{流量係数 } C_d [-] = \frac{\text{実際に流れる通過流量}}{\text{流体が等エントロピー変化かつチョーク状態で流れる通過流量}}$$

すきま部を通過する流れに作用する粘性の影響によって、流れは非等エントロピー変化となるが、それをポリトロップ変化として取扱う。すなわち、流量係数は、ポリトロップ変化を仮定した場合のスロート通過流量と等エントロピー変化を仮定した場合のスロート通過流量の比として計算できる。

第1章図1.2にて示した、実際の真空シール装置のロール間流路を図5.14に示される円筒間流路によって模擬する。ロール壁において断熱条件を仮定すると、次式の一次元エネルギー保存式が成り立つ。

$$\frac{1}{2}u^2 + \frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{P}{\rho} = \frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{P_0}{\rho_0} \quad (5.5.1)$$

ここで、

- u : すきま内の任意点の流速 [m/s]
- γ : 比熱比 [-]
- P : すきま内の任意点の圧力 [Pa]
- ρ : すきま内の任意点の密度 [kg/m³]

であり、また図5.14中に記載したように

- \bar{R} : ロール半径 [m]
- $h(x)$: ロールギャップ [m]
- h_0 : ロール間最小すきま [m]

添字0 : 無限上流点

添字1 : 無限下流点

を導入する。ここで、ポリトロップ指数 m を用いて、 P と ρ の関係を

$$P/\rho^m = P_0/\rho_0^m \quad (5.5.2)$$

によって記述する。式(5.5.1)、式(5.5.2)より

$$\frac{1}{2}u^2 + \frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{P_0}{\rho_0} \left(\frac{P}{P_0} \right)^{\frac{\gamma-1}{m}} = \frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{P_0}{\rho_0} \quad (5.5.3)$$

が得られる。スロート部で音速となる場合には

$$u = \sqrt{\gamma \frac{P}{\rho}}$$

を式(5.5.3)に代入して、 P について解くと、スロート部の諸量 P^* 、 ρ^* 、 u^* は次式となる。

$$\left. \begin{aligned} \frac{P^*}{P_0} &= \left(\frac{2}{\gamma+1} \right)^{\frac{m}{m-1}} \\ \rho^* &= \left(\frac{P^*}{P_0} \right)^{\frac{1}{m}} \rho_0 \\ u^* &= \sqrt{\gamma \frac{P^*}{\rho^*}} \end{aligned} \right\} \quad (5.5.4)$$

等エントロピー流れと考えられる場合には $m=\gamma$ であるから、

$$\begin{aligned} \bar{u} &= \sqrt{\frac{2}{\gamma+1}} \sqrt{\gamma R T_0} \\ \bar{\rho} &= \left(\frac{2}{\gamma+1} \right)^{\frac{1}{\gamma-1}} \rho_0 \end{aligned}$$

となる。故に流量係数 C_d は次式で表現される。

$$C_d = \frac{u^* \rho^*}{\bar{u} \bar{\rho}} \quad (5.5.5)$$

次にポリトロップ指数 m を決定する。

まず初めにスロート部で臨界となっている場合を取り上げる。以上の解析とは異なって、 $m=\gamma$ とする取扱いをする一方で、粘性の影響を取り込むために、式(5.5.1)において、圧損項を追加導入する。

$$\frac{1}{2}u^2 + \frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{P_0}{\rho_0} \left(\frac{P}{P_0} \right)^{\frac{\gamma-1}{m}} + \Lambda \frac{1}{2}u^2 = \frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{P_0}{\rho_0} \quad (5.5.6)$$

この式を式(5.5.3)と同値とすると

$$\frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{P_0}{\rho_0} \left(\frac{P}{P_0} \right)^{\frac{\gamma-1}{m}} = \frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{P_0}{\rho_0} \left(\frac{P}{P_0} \right)^{\frac{\gamma-1}{m}} + \Lambda \frac{1}{2}u^2 \quad (5.5.7)$$

が成立する。後述するように、ロール間流路を最小すきま h_0 で代表した等価な平行平板間流路とみなすと、

$$\Lambda = \begin{cases} \frac{96}{Re} \left(1 + 6 \frac{2-\sigma}{\sigma} \frac{\ell}{h_0} \right)^{-1} \frac{L}{2h_0} & \text{〔層流〕} \end{cases} \quad (5.5.8)$$

$$\begin{cases} 0.3164 Re^{-\frac{1}{4}} \frac{L}{2h_0} \left(1 + 6 \frac{2-\sigma}{\sigma} \frac{\ell}{h_0} \right)^{-1} & \text{〔乱流〕} \end{cases} \quad (5.5.9)$$

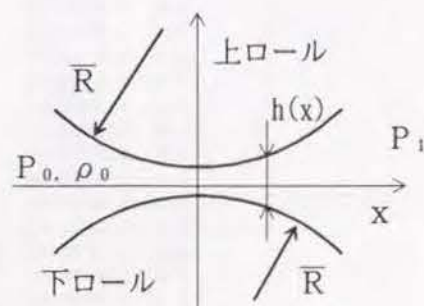


図5.14 シール装置のロール間流路

$$Re = \frac{\rho(2h_0)u}{\mu} \quad (5.5.10)$$

と記述できる。ここで、各種の記号は、

- Λ : 圧損係数 [-]
- L : ロール間等価有効長 [m]
- σ : 壁面のすべり係数 [-]
- ℓ : 平均自由行程 [m]
- Re : レイノルズ数 [-]
- μ : 粘性係数 [Pa·s]
- * : 臨界状態を示す添字

である。 Λ , L , ℓ については後に検討を加える。スロート部で臨界状態とすると、式(5.5.6)より臨界圧力比は

$$\frac{P^*}{P_0} = \left\{ \frac{(1+\Lambda)(\gamma-1)}{2} + 1 \right\}^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} \quad (5.5.11)$$

となる。

以上、式(5.5.7)と(5.5.11)を連立して解き、臨界状態の値 u^*, P^*, ρ^*, m, T^* を求めることができる。これらの値より、損失のない等エントロピ流の場合 ($\Lambda=0$) のスロート部流量を基準にした流量係数 C_d が式(5.5.5)によって決定できる。

実際の演算にあたっては、連立方程式(5.5.7)と式(5.5.11)を ρ^*, m を主変数として解く。そこで、式(5.5.4)を用いて P^*, u^* を ρ^* で書き換えた式で説明を行う。次式で定義される関数、 F, G を導入する。

$$F(\rho^*, m) = \frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{P_0}{\rho_0} \left(\frac{\rho^*}{\rho_0} \right)^{m-1} - \frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{P_0}{\rho_0} \left(\frac{\rho^*}{\rho_0} \right)^{\frac{m(\gamma-1)}{\gamma}} - \Lambda \frac{1}{2} \gamma \frac{P_0}{\rho_0} \left(\frac{\rho^*}{\rho_0} \right)^{m-1} \quad (5.5.12)$$

$$G(\rho^*, m) = \left(\frac{\rho^*}{\rho_0} \right)^m - \left\{ \frac{(1+\Lambda)(\gamma-1)}{2} + 1 \right\}^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} \quad (5.5.13)$$

ただし、

$$\Lambda = \left\{ \frac{96\mu}{(2h_0)\rho^* \sqrt{\gamma \frac{P_0}{\rho^*} \left(\frac{\rho^*}{\rho_0} \right)^m}} \left(1 + 6 \frac{2-\sigma}{\sigma} \frac{k}{4\sqrt{2}h_0\pi r^2 \rho^* R} \right)^{-1} \frac{L}{2h_0} \right. \quad (5.5.14)$$

$$\left. 0.3164 \left(\frac{(2h_0)\rho^* \sqrt{\gamma \frac{P_0}{\rho^*} \left(\frac{\rho^*}{\rho_0} \right)^m}}{\mu} \right)^{-1/4} \cdot \frac{L}{2h_0} \left(1 + 6 \frac{2-\sigma}{\sigma} \frac{k}{4\sqrt{2}h_0\pi r^2 \rho^* R} \right)^{-1} \right\} \quad (5.5.15)$$

式(5.5.7)(5.5.11)を満足するように $F=G=0$ の解を計算する。Newton-Raphson法により初期値 $\rho^* = 0.5\rho_0$, $m = 1.4$ として出発し、

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial F}{\partial \rho^*} & \frac{\partial F}{\partial m} \\ \frac{\partial G}{\partial \rho^*} & \frac{\partial G}{\partial m} \end{pmatrix}^{[K]} \begin{pmatrix} \rho^* \\ m \end{pmatrix}^{[K+1]} = \begin{pmatrix} \frac{\partial F}{\partial \rho^*} \rho^* + \frac{\partial F}{\partial m} m - F \\ \frac{\partial G}{\partial \rho^*} \rho^* + \frac{\partial G}{\partial m} m - G \end{pmatrix}^{[K]} \quad (5.5.16)$$

を満足する次の反復公式で解を求める。

$$\begin{pmatrix} \rho^* \\ m \end{pmatrix}^{[K+1]} = \frac{1}{\left(\frac{\partial F}{\partial \rho^*} \frac{\partial G}{\partial m} - \frac{\partial F}{\partial m} \frac{\partial G}{\partial \rho^*} \right)^{[K]}} \begin{pmatrix} \frac{\partial G}{\partial m^*} - \frac{\partial F}{\partial m} \\ -\frac{\partial G}{\partial \rho^*} & \frac{\partial F}{\partial \rho^*} \end{pmatrix}^{[K]} \begin{pmatrix} \frac{\partial F}{\partial \rho^*} \rho^* + \frac{\partial F}{\partial m} m - F \\ \frac{\partial G}{\partial \rho^*} \rho^* + \frac{\partial G}{\partial m} m - G \end{pmatrix}^{[K]} \quad (5.5.17)$$

なお $\frac{\partial F}{\partial \rho^*}$, $\frac{\partial F}{\partial m}$, $\frac{\partial G}{\partial \rho^*}$, $\frac{\partial G}{\partial m}$ は数値微分で評価した。

つぎに、スロート部で臨界とならない場合について検討を加える。まず上流と下流の平均値を $\tilde{P} = \frac{P_1 + P_2}{2}$ と定義する。この値を式(5.5.6)に代入すると

$$\frac{1}{2} \tilde{u}^2 + \frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{P_0}{\rho_0} \left(\frac{\tilde{P}}{P_0} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} + \Lambda \frac{1}{2} \tilde{u}^2 = \frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{P_0}{\rho_0} \quad (5.5.18)$$

また、式(5.5.7)から

$$\frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{P_0}{\rho_0} \left(\frac{\tilde{P}}{P_0} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} + \Lambda \frac{1}{2} \tilde{u}^2 = \frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{P_0}{\rho_0} \left(\frac{\tilde{P}}{P_0} \right)^{\frac{m-1}{m}} \quad (5.5.19)$$

$$\tilde{P}/\tilde{\rho}^m = P_0/\rho_0^m \quad (5.5.20)$$

と書ける。上の3式を解くことにより、ロール間流路と等価な平行平板間流路における $\tilde{\rho}$, \tilde{u} の解を得ることが出来る。この解より次の値を計算する。

$$\left. \begin{aligned} \tilde{T} &= \frac{\tilde{P}}{\tilde{\rho} R} \\ \tilde{a} &= \sqrt{\gamma R \tilde{T}} \\ M &= \tilde{u} / \tilde{a} \end{aligned} \right\} \quad (5.5.21)$$

流量係数 C_d は次式で求まる。

$$C_d = \frac{\tilde{u} \tilde{\rho}}{\tilde{u} \tilde{\rho}} \quad (5.5.22)$$

実際の算出にあたっては \tilde{u}, m を主変数として解く。式(5.5.20)より

$$\tilde{\rho} = \rho_0 \left(\frac{\tilde{P}}{P_0} \right)^{\frac{1}{m}}$$

である。 $H(\tilde{u}, m)$, $I(\tilde{u}, m)$ を次のように定義する。

$$\begin{cases} H(\tilde{u}, m) = \frac{1}{2} \tilde{u}^2 + \frac{\gamma}{\gamma-1} \left(\frac{P_0}{\rho_0} \right) \left(\frac{\tilde{P}}{P_0} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} + \Lambda \frac{1}{2} \tilde{u}^2 - \frac{\gamma}{\gamma-1} \left(\frac{P_0}{\rho_0} \right) \\ I(\tilde{u}, m) = \frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{P_0}{\rho_0} \left(\frac{P}{P_0} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} + \Lambda \frac{1}{2} \tilde{u}^2 - \frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{P_0}{\rho_0} \left(\frac{\tilde{P}}{P_0} \right)^{\frac{m-1}{m}} \end{cases} \quad (5.5.23)$$

$$(5.5.24)$$

$$\Lambda = \left\{ \frac{96\mu}{\rho_0 \left(\frac{P}{P_0} \right)^{\frac{1}{m}} (2h_0) \tilde{u}} \left(1 + 6 \frac{2-\sigma}{\sigma} \frac{k}{4\sqrt{2}h_0\pi r^2 \rho_0 \left(\frac{P}{P_0} \right)^{\frac{1}{m}} R} \right)^{-1} \cdot \frac{L}{2h_0} \right. \\ \left. 0.3164 \left(\frac{\rho_0 \left(\frac{P}{P_0} \right)^{\frac{1}{m}} 2h_0 \tilde{u}}{\mu} \right)^{-1/4} \cdot \frac{L}{2h_0} \left(1 + 6 \frac{2-\sigma}{\sigma} \frac{k}{\sqrt{2}h_0\pi r^2 \rho_0 \left(\frac{P}{P_0} \right)^{\frac{1}{m}} R} \right)^{-1} \right\} \quad (5.5.25)$$

$$(5.5.26)$$

式(5.5.18)(5.5.19)から、 $H=I=0$ であるべきなので、それを満足する \tilde{u}, m を式(5.5.16), 式(5.5.17)を使用した $F=G=0$ の解法と同様の方法によって解いた。

先に、すべり速度のある場合の平行平板間流路の圧損係数の式として、式(5.5.8)及び式(5.5.9)を提示したが、その導出方法を説明する。

流れが層流の場合には、

$$\frac{1}{\rho} \frac{dP}{dx} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \quad (5.5.27)$$

とできる。壁面上でのすべりによる速度を u_0 として、境界条件 $y=0$ で $u=u_0$, $y=h$ で $u=u_0$ を用いると、次の解を得る。

$$u = \frac{1}{\nu} \left(\frac{1}{\rho} \frac{dP}{dx} \frac{y^2}{2} - \frac{1}{\rho} \frac{dP}{dx} \frac{hy}{2} + \nu u_0 \right) \quad (5.5.28)$$

式(5.5.28)より、壁面の速度勾配は

$$\left. \frac{du}{dy} \right|_{y=0} = \left. \frac{du}{dy} \right|_{y=h} = -\frac{1}{\mu} \frac{dP}{dx} \frac{h}{2} \quad (5.5.29)$$

一方、平均流速

$$U = \frac{1}{h} \int_0^h u dy = u_0 - \frac{1}{\mu} \frac{dP}{dx} \frac{h^2}{12} \quad (5.5.30)$$

から圧力勾配を求めると

$$\frac{dP}{dx} = \frac{-12\mu}{h^2} (U - u_0) \quad (5.5.31)$$

となる。式(5.5.29)と式(5.5.31)より、速度勾配は、

$$\left. \frac{du}{dy} \right|_{y=0} = \left. \frac{du}{dy} \right|_{y=h} = -\frac{6(U - u_0)}{h} \quad (5.5.32)$$

となる。一方、すべり速度 $u_0 = \frac{2-\sigma}{\sigma} \ell \frac{du}{dy}$ だから^[C4] (ℓ : 平均自由行程)

$$\frac{du}{dy} = 6 \frac{U}{h} \left(1 + 6 \frac{2-\sigma}{\sigma} \frac{\ell}{h} \right)^{-1} \quad (5.5.33)$$

故に、壁面せん断応力は

$$\tau = \mu \frac{\partial u}{\partial y} = 6\mu \frac{U}{h} \left(1 + 6 \frac{2-\sigma}{\sigma} \frac{\ell}{h} \right)^{-1} \quad (5.5.34)$$

となる。ロール間流路と等価な平行平板間流路における圧力差と壁面応力のつり合いより

$$\Delta P h_0 = 2\tau L \quad \text{だから}$$

$$\Delta P = \frac{2\tau L}{h_0} = \frac{96}{Re} \cdot \left(1 + 6 \frac{2-\sigma}{\sigma} \frac{\ell}{h_0} \right)^{-1} \frac{L}{2h_0} \frac{\rho U^2}{2}$$

したがって、 Λ は

$$\Lambda = \frac{96}{Re} \left(1 + 6 \frac{2-\sigma}{\sigma} \frac{\ell}{h_0} \right)^{-1} \frac{L}{2h_0} \quad (5.5.35)$$

と決定できる。これが式(5.5.8)である。

流れが乱流の場合には、連続流に対するブラジウスの式 $\lambda = 0.3164 Re^{-1/4}$ に対して、層流式を導いた時に表れる補正值

$$\left(1 + 6 \frac{2-\sigma}{\sigma} \frac{\ell}{h_0} \right)^{-1}$$

を導入するものとして、

$$\Lambda = 0.3164 Re^{-1/4} \left(1 + 6 \frac{2-\sigma}{\sigma} \frac{\ell}{h_0} \right)^{-1} \frac{L}{2h_0} \quad (5.5.36)$$

と表す。 Λ の計算に必要な平均自由行程 ℓ は次式で計算する。

$$\ell = \frac{kT}{4\sqrt{2}\pi r^2 P} = \frac{k}{4\sqrt{2}\pi r^2 \rho R} \quad (5.5.37)$$

R : ガス定数 [J/kgK]

k : ボルツマン定数 [J/K] (1.38×10^{-23} J/K)

T : ガス温 [K]

r : 分子半径 [m]

P : 圧力 [Pa]

式(5.5.8), 式(5.5.9)に用いた断面積が変化するロール間流路の等価長さ L の計算式を導く。図5.15の異径平行流路が連結されている状態を考える。それぞれの部分の圧力損失

$$\Delta P_1 = \lambda \frac{\ell_1}{2d_1} \frac{\rho u^2}{2g}, \quad \Delta P_2 = \lambda \frac{\ell_2}{2d_2} \frac{\rho \left(u \frac{d_1}{d_2}\right)^2}{2g}$$

を用いて連結時の圧力損失 ΔP を計算する。

$$\begin{aligned} \Delta P &= \Delta P_1 + \Delta P_2 = \lambda \left(\frac{\ell_1}{2d_1} + \frac{\ell_2}{2d_2} \frac{d_1^2}{d_2^2} \right) \frac{\rho u^2}{2g} \\ &= \lambda \frac{1}{2d_1} \left\{ \ell_1 + \ell_2 \left(\frac{d_1}{d_2} \right)^3 \right\} \frac{\rho u^2}{2g} \end{aligned}$$

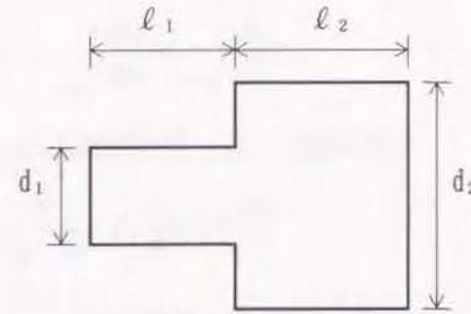


図5.15 等価長さ計算モデル

従って、管の代表径を $2d_1$ としたときの等価長さ L_{12} は

$$L_{12} = \ell_1 + \ell_2 \left(\frac{d_1}{d_2} \right)^3 \quad (5.5.38)$$

であり、管径比との3乗に逆比例する長さとなる。このことを考慮して、すきま形状を $d = h(x)$ とするとき、

$$L = \int_{x_1}^{x_2} \left(\frac{h_0}{d} \right)^3 dx = h_0^3 \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{h(x)^3} \quad (5.5.39)$$

を考えて、これを等価長さとして使用する。ここで、 h_0 はロール間最小すきまである。

なお、積分区間のとり方については最上流点より、スロート部までを考えるものとし、スロート部下流の流路は考慮しない。

最後にロール間流路内各位置における流速の計算式を導く。式(5.5.2)(5.5.3)ならびに質量保存則から、

$$\frac{1}{2} u^2 + \frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{P_0}{\rho_0} \left(\frac{P}{P_0} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} = \frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{P_0}{\rho_0} \quad (5.5.40)$$

$$\rho u h(x) = \tilde{\rho} \tilde{u} h_0 \quad (5.5.41)$$

$$\frac{P}{P_0} = \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^m \quad (5.5.42)$$

である。いま、

$$J(u) = \frac{1}{2} u^2 + \frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{P_0}{\rho_0} \left(\frac{\tilde{\rho} \tilde{u} h_0}{\rho_0 h(x)} \right)^{m-1} \left(\frac{1}{u} \right)^{m-1} - \frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{P_0}{\rho_0} \quad (5.5.43)$$

を導入すると、式(5.5.40)から $J = 0$ のはずであるので、これを満足するように $h(x)$ と u の関係を求める。演算には u を変数としてNewton-Raphson法を用いる。

図5.16に以上導入した簡易解析理論の結果を文献[A10]の流量係数の実験データと比較した。本解析理論は簡易ながらも、よく実験結果を予測しており、妥当であることがわかる。

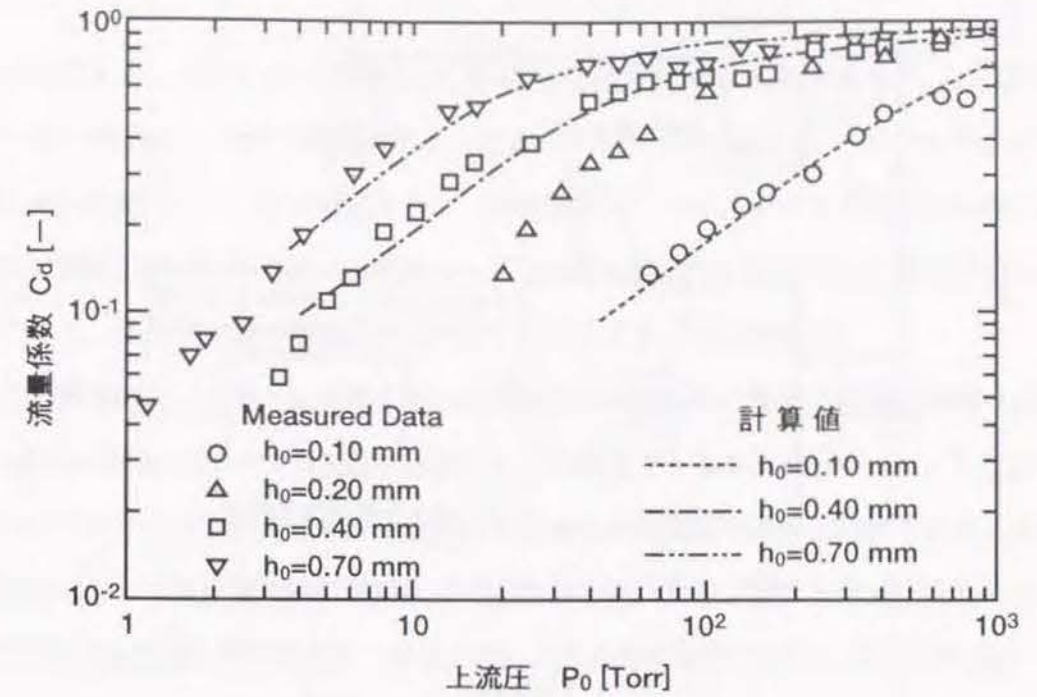


図5.16 微小ギャップ通過流量の流量係数計算理論の妥当性

5.6 I₂-LIFによる真空シール装置ロール間の流速測定

本節では、前5.4節において希薄気体流れの速度測定法として有用な手段であることが実証されたI₂-LIF法を工学的な応用例に適用して、その有用性について吟味する。

適用例として、連続真空シール装置におけるシールロール間流れを選ぶ。第1章1.2.1(2)項で説明したように真空シール装置の設計において、まず第1に要求される知見は、シール装置のシールギャップと通過流量の関係である。本節では、特に2本のシールロール間の流れをとり上げ、シールギャップ流速をレーザ誘起蛍光法(I₂-LIF)によって非接触で測定した結果について述べる。

図5.17にI₂-LIFを用いるロール間流れの測定装置を示す。計測に使用したロール間流れモデルを図5.18に示す。局所流速を図中のx軸方向に沿う各位置で測定した。ロールの奥行きは、ロール間の最少ギャップの120倍であるので、ロール中央の流れ場は、ロールの端の影響を殆ど受けない2次元流れと見なすことができる。リングダイレーザは本章5.4節と同様に、流れの下流方向から入射する。ロール間流れモデルの側板は石英ガラスで出来ており、側板を介して蛍光を図5.9と同様に測定することができる。

図5.19にI₂-LIFによるロール間流れに対する流速測定結果を示す。図5.19には、本章5.5節で示した簡易理論解析による計算結果を合わせて示した。前節の簡易解析理論はスロート近傍を等価な平行平板とみなしたものであるため、スロートから離れた位置における流速は予測できない簡易理論であり、局所値に対してはスロート近傍に限って成立する。本実験との対応性を考えると、等価流路長 L は3 mm程度であり、スロートから3 mm以上離れると次第に精

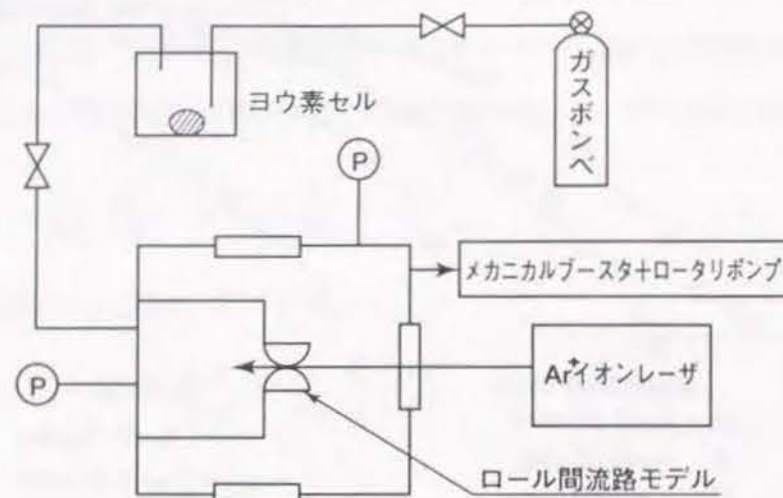


図5.17 ロール間流れ場測定装置

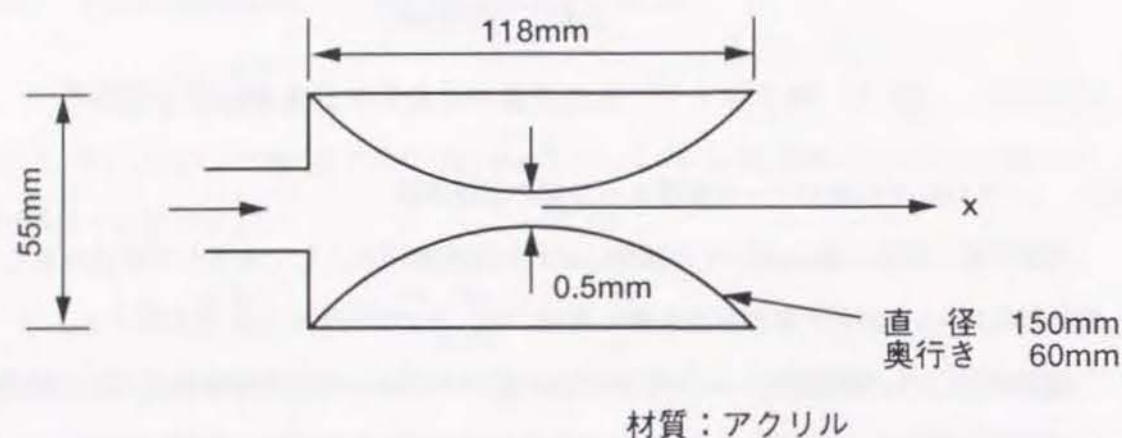


図5.18 ロール間流路のモデル

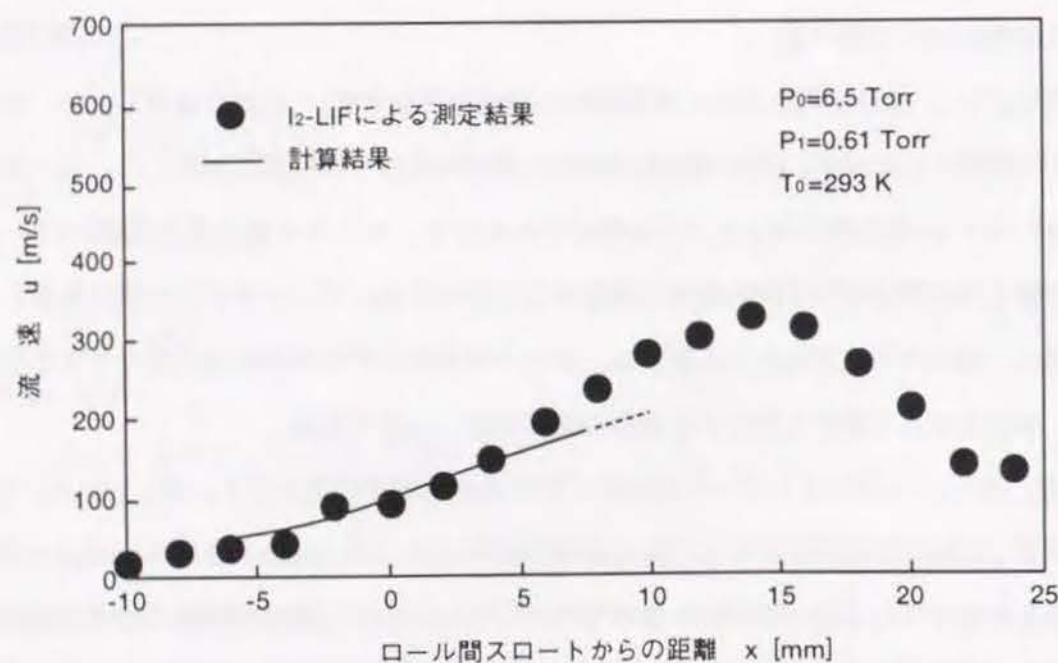


図5.19 ロール間流れ場の流速分布測定結果

度が低下する。このため、理論値はスロート近傍領域でのみ示してある。 I_2 -LIFの測定結果と解析結果はスロート部近傍で合っており、 I_2 -LIFによって、シールギャップの流速を正確に計測できることが実証された。本実験では、シールギャップ部からかなり下流の部分まで測定を試みているが、流れがロール下流部で膨張し加速している現象が良くとらえられている。また下流側で衝撃波も発生していないことが確認できる。

この実験によってギャップ0.5mmの流路における約1 Torr程度の希薄気体流れに対して、 I_2 -LIFは100m/sオーダの流速を測定する上で有効であることがわかった。したがって、それはシールギャップの通過リーク流量を算出する上で有効であると結論できる。すなわち、本実験によって真空装置等に工業上よくみられる狭いすきま内の希薄気体流れに対して I_2 -LIFを用いる流速計測技術を広く適用するための基礎が確立できたと考えられる。

5.7 結 言

第4章に導出した、 I_2 分子の核スピンに起因する超微細構造を含む回転スペクトル線形状の理論を用いて、 I_2 -LIFによる希薄気体流れの流速測定が可能かどうかを実験的に検討して、下記の結論を得た。

- (1) 軸対称超音速自由噴流中において、 I_2 の蛍光スペクトル形状を測定した。その結果、ノズルから下流になるにつれて、気体温度の低下に伴って I_2 スペクトル形状が1山パターンから4山パターンへと移行していく現象が観察された。このことから、第4章のスペクトル形状理論が妥当であることが検証できた。
- (2) 軸対称超音速自由噴流中の中心軸上の各位置でドップラシフト量を測定し、第4章の理論に従ってみかけのピーク周波数シフトを補正し、速度分布を求めた。その結果は、従来の自由噴流理論による速度分布とほぼ一致した。用いた自由噴流は1 Pa程度の希薄気体流れであり、 I_2 -LIFが希薄気体流れの非接触流速測定法として有用であることがわかった。
- (3) I_2 -LIFによる流速測定法を本研究の重要な課題である真空蒸着装置におけるシール装置ロール間ギャップ(0.5mm)流れに適用した。その結果得られた流速分布は、粘性損失を考慮した簡易理論解析による計算値とほぼ一致し、従来測定が困難であった0.5mm程度の狭いすきま内の100Paレベルの希薄域(クヌーセン数約0.1)流れにおいてほぼ正確な流速分布が得られた。これにより、 I_2 -LIFが希薄気体流れの流速測定法として有用性を持つことが確認でき、真空装置等に見られる流れに対する流速測定技術の基礎を確立した。

第 6 章

結 言

結 言

Zn蒸着めっき鋼板製造設備、及びAl蒸着プラスチックフィルム製造設備などの薄膜製造分野において、工業上しばしば遭遇する希薄気体流れを非接触かつ定量的に診断する手法としてレーザー誘起蛍光法(LIF法)に着目し、 O_2 -LIPFによる温度測定と I_2 -LIFによる流速測定に関する研究を行った。その結果、次の成果が得られた。

- (1) O_2 -LIPF法を用いた温度測定については、第2章において、工業的応用が広いと考えられる2原子分子を対象とするレーザー誘起蛍光法の回転スペクトル解析理論を一般的に提示し、 O_2 シューマン・ルンゲ・バンドについて具体的に理論解析を行った。第3章に記述した O_2 -LIPF実験の結果から、この回転スペクトル解析理論が妥当であることが実証され、2原子分子気体に対してレーザー誘起蛍光法を応用するための基礎理論を確認することが出来た。第3章では、真空蒸着機内の蒸発面や蒸着面などに見られる入射分子と反射分子が混在する遷移流域に対して、回転温度測定を試みた。このことによって固体表面における分子の熱的適応性を論じるための実験手法の基礎が確立できたと思われる。

I_2 -LIFを用いた流速測定については、第4章においてドップラシフト量を正確に把握し、流速測定を精度よく行うために、回転スペクトル中に含まれる核スピンの起因する超微細構造の効果を考慮した I_2 -LIF理論を構築した。第5章では狭帯域レーザー光源であるリングダイレーザーを用いた I_2 -LIFによって超音速自由噴流中の流速測定を行い、第4章に展開した理論が妥当であるとの結論を得た。本論文で展開した超微細構造を考慮した理論によって、ドップラシフト量が大きい音速に近い流速域のみならず、流速の遅い領域にまで I_2 -LIFの測定精度を確保することが期待出来るようになったため、 I_2 -LIFの工業上の応用範囲の拡大に貢献できると考えられる。

- (2) 本研究ではレーザー誘起蛍光法の基本特性を検討するにあたって、蛍光信号を可視化実験のように蛍光総量としてマクロにとらえるのではなく、分子の並進運動・振動運動・回転運動・電子スピン運動・原子核スピン運動を含む蛍光スペクトルの超微細構造にまで議論を進める事によって、理論的に得られた蛍光スペクトルパターンと、希薄気体流れ場における温度・速度の値との関連性を明らかにするべく努めた。分子・原子の微視的視点から現象を解析するアプローチが、各種の先端技術問題解決に共通な有力な手法になると認識からである。その意味で、第2章で論じた O_2 -LIPFを対象にした回転スペクトルと電子スピンによる3重項分裂スペクトルの理論、及び、第4章で論じた I_2 -LIFを対象にした原子核スピンによる回転スペクトル線の超微細構造の理論は本論文の根幹となっている。これらの各章では、従来の物理化学基礎研究分野において蓄積されてきた知見を、工学分野におけるレーザー誘起蛍光法の確立のために必要となる2原子分子のスペクトルシミュレーションの枠組の中で、統

一的観点から再構築することを試みた。その結果、 O_2 、 I_2 の異なる分子に対して共通して応用できる手法を提供することが出来た。従来の物理化学の基礎研究で得られている分子データを、希薄気体流れに関して工学的に必要な諸量である温度、速度の計測技術へ理論的・実験的に結びつけることが出来た意義は大きいと考えられる。

(3) 第2章においては、主としてArF*エキシマレーザ波長域において振動・回転温度非平衡場に対して O_2 -LIPFを用いた場合に、振動温度と回転温度の組合せによってどの様にスペクトルパターンが変化するかについて、主としてArF*エキシマレーザ波長域において理論的に論じた。その結果、(a)振動・回転温度の変化に対して、スペクトル形状の変化が敏感である領域とそうでない領域があること、(b)温度領域により支配的バンドが変化すること、(c)スペクトル形状が測定ステップと前期解離線幅との関係で成立すること、が分かり、 O_2 -LIPFを用いた振動・回転温度非平衡場を測定するにあたって実用上の配慮すべき点を明確にすることが出来た。非平衡温度場に対する過去の研究例は十分でなく、本論文において、希薄気体流れに特有の非平衡現象を解明する手段としての足掛かりが得られた。

第4章において、 I_2 分子の核スピンの起因する超微細構造スペクトル線のドップラシフト量と流速の関連性について理論的に論じた。従来行われてきた回転スペクトル線のドップラシフト量のみを考える手法では速度測定分解能を上げることが出来ないことから、線幅が極小の超微細構造を利用することに着眼した。量子力学的研究成果に基づいたスペクトル形状を検討した結果、工業上重要な量である流速の測定に関連し、圧力・温度の変化に伴うスペクトルの変化のためにみかけ上ピーク周波数シフトが観察されることを指摘し、その大きさを定量的に評価する手法を提示した。この事実については、従来認識がなかったため、本論文の研究成果は、 I_2 -LIFによる流速測定精度向上に貢献することが期待できる。

(4) 第2章から第5章において論じた2原子分子を対象とするレーザ誘起蛍光法の研究成果の実際の真空蒸着機内希薄気体流れへの応用例として、連続真空シール装置におけるシールロール間流れを取り上げ、洩れ流量(流速)の定量的把握を試みた。その結果0.5mmの狭いシールギャップにおける流速をほぼ正確にとらえることが出来、 I_2 -LIF法の実用性を示すことが出来た。真空中におけるシールギャップからの洩れ流量は、従来総流量としてのみ流量計により計測されていたが、 I_2 -LIF法の応用により局所の流速分布まで把握することが可能となった点の工業的意義は大きいものと思われる。

レーザ誘起蛍光法は、本来原子・分子の物理化学的性質を基礎的に調べる為の手段として成果をあげて来たが、本研究によって工業分野のレーザ誘起蛍光法という観点からでも、実用性が期待できる手法であることが明らかになった。分子・原子レベルの情報は機能材膜を形成するための真空蒸着機的设计において、今後不可欠の情報となるものと考えられる。し

たがって、真空蒸着装置の設計段階における

- (a) 所定の蒸着膜厚分布を得るための蒸气流路の設計
- (b) 非凝縮性気体の抑制及び供給方法の決定
- (c) 所定の蒸発分布を得るためのろつば回りの設計
- (d) 所定の機能材膜性能を得るための成膜の分子配向と蒸着分子入射角のあり方についての設計

等に対して、Trial & Error的に改良指針を積み上げる開発手順ではなく、今後は

- (a) 流れ場内の局所のレーザ誘起蛍光法による物理量の定量的測定
- (b) 全体の流れ状況を概観するための流れの可視化
- (c) 実蒸気の模擬蒸気を用いた相似モデル実験

を工業的ニーズに応じて適宜併用し、分子レベルから蒸着現象を推論してハードを決定する開発手順が必要不可欠なものとなると予想される。本論文の成果は、その方向への踏み出しに有効な手がかりを提示したものと考えられる。

レーザは近年急速に技術革新が進み、種々の波長、線幅に対し商用レーザとして入手が容易となってきている。これは、従来主として分光学の分野で限られた実験室環境においてのみレーザが使用されてきた時代から、工業的実環境へのレーザ技術の適用を模索する時代へと移行しつつある事を意味している。したがって、原子・分子レベルの挙動を把握できるレーザ分光の技術を物理化学の基礎研究分野から開放し、工業上の技術開発と云う土俵へ持ち込むことによって、将来的には設計者の間で不可知とされていた金属蒸气流れ等の温度・速度・密度などについても、定量的測定が可能になるものと考えられ、レーザ誘起蛍光法は希薄気体流れを扱う工業分野においてオールマイティな診断法として今後大きく発展し、工業上の主流となるものと考えられる。今後、著者の担当する真空蒸着機の開発に本研究の成果を役立てながら、基礎的立場から定量性に関してさらに研究を行い、精度向上等の残された課題を解決していきたい考えである。

1983年に三菱重工業株式会社に入社してから4年目の1986年に、初めて真空蒸着機の開発に従事し、「真空」という現象に接した時、真空蒸着に関連した希薄流体の研究が発展し博士論文のテーマとなろうとは夢にも予想していなかった。その時まで私は連続流域の粘性流を扱う流体研究者であり、流体分野の中でもむしろ希薄流体とは対極にある非ニュートン流体の研究などを主体に研究していたからである。当時私は非ニュートン流体でも特に粘弾性流体の挙動に関することが、将来の自分自身の博士論文のテーマとなることを予想していたが、大きな転機が訪れた。それは、ある意味で偶然的とも啓示的とも思われるが、ゲッチンゲンのドイツ航空宇宙研究所(DLR)への留学である。1991年から1992年にかけてのゲッチンゲンでの1年半は私を完全に希薄流体力学分野とレーザ分光学分野へと指向させた。本論文の骨子及び学問的基礎はゲッチンゲンでの1年半に負うところが大きい。私はその意味で、まずDLRにおいて私の研究をサポートしてくれたCarl Dankert氏、Hubert Legge博士、私のよき友であり実験研究の相棒であったGerhard Gundlach博士、実験の面倒をいつも見てくれたKlaus Lehmköster氏に感謝の意を捧げたい。1992年秋、日本に帰国してから恩師鈴木健二郎教授に博士論文の取纏めについての御指導をお願いしてから早や4年。遅々として研究はすすまなかったが、ようやく執筆を開始したのが1995年秋。博士論文を審査していただいた京都大学工学部の鈴木健二郎教授、藤本孝教授、牧野俊郎教授には御多忙の中多大な御助言を賜りました。厚く御礼申し上げる次第であります。

博士論文の成果は私個人のみの成果ではないことは言うまでもありません。博士論文を人生の中の1つのマイルストーンと見れば、このマイルストーンを築くことの出来た過程の中には私自身の人生体験がすべて凝縮していると云っても過言ではありません。私をいつも見守ってくれた父母には何の御恩返しも出来ませんが、本論文の完成で1つの御返しが出来るならば本当にうれしく思います。家内にはウィークエンドや連休の大部分を博士論文執筆に捧げ自宅の書斎にこもりがちであった事、家族サービスが出来なかった事に対してすまなく思っています。

三菱重工業株式会社の諸先輩、同僚、後輩の方々には御世話になった方々がたくさんあります。ここに、すべての方々の御名前を挙げる事が出来ないのは非常に残念に思います。その中でも特に、広島研究所の柳謙一所長、高原茂主管、橋本律男室長、田口俊夫主務、栗田耕一主任には本論文の完成の為に格別な御配慮をいただき、その御恩は私の大きな財産となっています。本当に有難うございました。

大学の諸先生方、特に京都教育大学手島光司教授、名古屋大学新美智秀助教授、山口大学宮本政英教授には公私ともに、レーザ分光学、希薄気体学の分野での専門的な御助言を数多く賜りました。厚く御礼申し上げる次第です。最後に本論文の浄書、校閲などに協力してくれた大成和子嬢、福岡美鈴嬢に深く感謝致します。

図表リスト

第1章 図表リスト

- 図1.1 真空蒸着亜鉛めっきライン構成
- 図1.2 真空シール装置
- 図1.3 蒸着室の構造
- 図1.4 付着量分布測定結果
- 図1.5 制御板
- 図1.6 各種測定法の適用範囲
- 図1.7 レーザ誘起蛍光法
- 図1.8 ドップラ型スペクトル形状
- 図1.9 ローレンツ型スペクトル形状
- 図1.10 複合型スペクトル形状
- 図1.11 空気の成分 (at 0.01atm)

- 表1.1 ライン仕様
- 表1.2 各種レーザ誘起蛍光法のまとめ
- 表1.3 本論文の内容及び構成

第2章 図表リスト

- 図2.1 酸素分子のポテンシャル曲線
- 図2.2 角運動量と電子スピン角運動量とのカップリングモデル
- 図2.3 シューマン・ルンゲ・バンドの構造
- 図2.4 振動準位エネルギー公式の評価結果
- 図2.5 回転準位エネルギー公式の評価結果
- 図2.6 ドップラ幅と前期解離線幅
- 図2.7 重み関数の形状
- 図2.8(1) スペクトル・シミュレーションの基本アルゴリズム
- 図2.8(2) シューマン・ルンゲ・バンド・シミュレーションのサブルーチン構成

図2.9	LIFとLIPFの相違
図2.10	O ₂ の上位準位の前期解離準位
図2.11	蛍光信号解析の二準位モデル
図2.12	上位準位及び下位準位の数密度時間変化解析結果
図2.13	LIPFにおける前期解離効果の解析結果
図2.14	シミュレーション値と文献値との比較
図2.15	シミュレーション値と文献値との比較
図2.16	本論文のシミュレーションスペクトルとLeeらの結果との比較
図2.17	本論文のシミュレーションスペクトルとLeeらの結果との比較
図2.18	シミュレーション結果 ($T_{vib} = T_{rot} = 300\text{K} \sim 2000\text{K}$)
図2.19	振動準位の占有率分布計算結果
図2.20	温度非平衡の場合のシミュレーション結果 ($T_{vib} = 1000\text{K}$, $T_{rot} = 50 \sim 1000\text{K}$)
図2.21	回転準位の占有率分布計算結果
図2.22	ArF*エキシマレーザ波長域の回転スペクトル
図2.23	ArF*エキシマレーザ波長域の回転スペクトルシミュレーション結果 ($T_{vib} = 1500\text{K}$ の場合)
図2.24	ArF*エキシマレーザ波長域の回転スペクトルシミュレーション結果 ($T_{vib} = 1000\text{K}$ の場合)
図2.25	ArF*エキシマレーザ波長域の回転スペクトルシミュレーション結果 ($T_{vib} = 500\text{K}$ の場合)
図2.26	ArF*エキシマレーザ波長域の回転スペクトルシミュレーション結果 ($T_{vib} = 300\text{K}$ の場合)
図2.27	ArF*エキシマレーザ波長域の回転スペクトルシミュレーション結果 ($T_{vib} = 100\text{K}$, 50K , 10K の場合)
表2.1	酸素分子の代表的遷移バンド
表2.2	振動準位エネルギーの公式の比較
表2.3	回転準位エネルギーの公式の比較
表2.4	X, B軌道に対する分子定数
表2.5	B軌道に対する分子定数
表2.6	本論文の解析で用いるSchlappの公式に対する補正值
表2.7	シューマン・ルンゲ・バンドのフランク・コンドン因子

表2.8	$^3\Sigma^- \rightarrow ^3\Sigma^+$ 遷移に対するヘーネル・ロンドン因子
表2.9	ArF*エキシマレーザ波長域における主要バンド
表2.10	$X^3\Sigma_g^-$ 軌道の振動準位占有率分布計算結果
表2.11	回転準位の占有率分布計算結果
表2.12	スペクトル強度の無次元化に用いた最大強度 I_{max} の計算結果
表2.13	各温度領域における支配バンド一覧

第3章 図表リスト

図3.1	前期解離線幅の影響によるスペクトル形状の相違
図3.2	レーザ掃引波長ステップの影響によるスペクトル形状の相違
図3.3	レーザ掃引波長ステップの影響によるスペクトル形状の相違計算結果
図3.4	O ₂ -LIPF実験で得られると予想される理論スペクトル (温度平衡気体の場合)
図3.5	O ₂ -LIPF実験で得られると予想される理論スペクトル (温度非平衡気体の場合)
図3.6	V2G風洞における軸対称自由噴流
図3.7	O ₂ -LIPF光学系
図3.8	真空空洞(V2G)の外観
図3.9	O ₂ -LIPF光学系の外観
図3.10	自由噴流ノズルの構造
図3.11	実験で得られた回転スペクトルと計算結果の比較
図3.12	自由噴流軸中心上で測定されたO ₂ -LIPFスペクトル
図3.13	自由噴流中心軸上O ₂ -LIPFスペクトル結果に基づいたボルツマン・プロット
図3.14	自由噴流中心軸上の回転温度分布測定結果
図3.15	表面近傍の流れ
図3.16	自由噴流中に円板を設置した場合のテストセクション
図3.17	マッハディスクが存在する場合の自由噴流
図3.18	マッハディスク後の回転スペクトル
図3.19	マッハディスク後の回転温度分布
図3.20	高回転温度域の回転スペクトルシミュレーション結果
図3.21	円板のある場合と無い場合のスペクトル比較
図3.22	$T_{rot} = 100\text{K} \sim 200\text{K}$ における回転スペクトルシミュレーション結果

図3.23 円板のある場合と無い場合の回転温度分布

図3.24 円板からの反射分子の回転温度

表3.1 $T_{\text{vib}} \approx 1000\text{K}$ の温度非平行気体の温度測定における支配的な遷移バンド

表3.2 自由噴流軸上の回転温度分布測定実験条件

表3.3 ブランチ番号一覧

表3.4 線幅についての計算結果と実験結果の比較

第4章 図表リスト

図4.1 流れ場中の I_2 分子とレーザ光波面の干渉

図4.2 流速とドップラシフト量の関係

図4.3 I_2 分子のポテンシャル曲線

図4.4 B-Xバンドの構造

図4.5 ハミルトニアン行列の構造

図4.6 B-Xバンドの計算結果（全体構造）

図4.7 B-Xバンドの計算結果（波長580.0~582.2nm）

図4.8 B-Xバンドの計算結果（波長580.88~581.10nm）

図4.9 (13, 0)バンドR18-P13ブランチ

図4.10 超微細構造計算結果の妥当性

図4.11 I_2 のスペクトル形状の分類

図4.12 超微細構造スペクトル計算結果（ $P=0.01[\text{Pa}]$ の場合）

図4.13 超微細構造スペクトル計算結果（ $P=0.1[\text{Pa}]$ の場合）

図4.14 超微細構造スペクトル計算結果（ $P=1[\text{Pa}]$ の場合）

図4.15 超微細構造スペクトル計算結果（ $P=10[\text{Pa}]$ の場合）

図4.16 超微細構造スペクトル計算結果（ $P=100[\text{Pa}]$ の場合）

図4.17 超微細構造スペクトル計算結果（ $P=1000[\text{Pa}]$ の場合）

図4.18 超微細構造スペクトル計算結果（ $P=10000[\text{Pa}]$ の場合）

図4.19 超微細構造スペクトル計算結果（ $P=100000[\text{Pa}]$ の場合）

図4.20 ドップラ幅及び衝突幅と温度の関係

図4.21 I_2 回転スペクトルのみかけのピーク周波数シフト

表4.1 $X^1\Sigma_g^+$ の振動エネルギー準位及び回転準位の分子定数

表4.2 $B^3\Pi_{ou}^+$ の振動エネルギー準位及び回転準位の分子定数

表4.3 ヘーネル・ロンドン因子の式

表4.4 B-Xバンドのフランク・コンドン因子

表4.5 ハミルトニアン行列の対角成分

表4.6 ハミルトニアン行列の非対角成分

表4.7 超微細構造の計算結果の妥当性評価（ $J=12$ の場合）

表4.8 超微細構造の計算結果の妥当性評価（ $J=\infty$ の場合）

表4.9 超微細構造の計算結果

表4.10 P13-R18の超微細構造の計算結果

表4.11 スペクトル形状の計算条件

第5章 図表リスト

図5.1 自由噴流の構造

図5.2 自由噴流軸上の温度分布例

図5.3 自由噴流軸上の速度分布例

図5.4 自由噴流可視化用実験装置

図5.5 自由噴流ノズル

図5.6 ノズル断面形状

図5.7 自由噴流可視化結果

図5.8 マッハ・ディスク位置の測定結果

図5.9 自由噴流の流速測定装置

図5.10 流速測定で得られるドップラシフト

図5.11 I_2 スペクトル形状測定結果

図5.12 集光角の影響を考慮したスペクトル形状

図5.13 自由噴流軸上の流速分布測定結果

図5.14 シール装置のロール間流路

図5.15 等価長さ計算モデル

図5.16 微小ギャップ通過流量の流量係数計算理論の妥当性

図5.17 ロール間流れ場測定装置

図5.18 ロール間流路のモデル

図5.19 ロール間流れ場の流速分布測定結果

表5.1 Ashkenasらの式における定数

表5.2 式(5.1)～(5.8)を用いて計算した自由噴流中心軸上の値

記号・添字

a	: 音速 m/s
A_L	: レーザビーム断面積 m^2
A	: 式(5.1)中の定数
B_v, D_v, H_v	: 回転準位に関する分子定数 cm^{-1}
c	: 光の速度 m/s
d^*	: ノズル径
D	: 検出ドップラ幅
e	: 電気素量
E_{NEQ}	: 四極子モーメント効果による振動数シフト量 MHz
E	: 遷移エネルギー cm^{-1}
$F(J)$: 回転エネルギー cm^{-1}
F_1, F_2, F_3	: 三重項準位
$f(\nu)$: スペクトル形状関数
F	: 核スピンを考慮した全角運動量を示す量子数
g	: 縮退度
$G(v)$: 振動準位 v に対する振動エネルギー cm^{-1}
h	: プランク定数
I	: 核スピン量子数
I_{exp}	: 実験で観測されるスペクトル強度
I_{ideal}	: 前期解離線幅を考慮したスペクトル強度
$P_{J^*J^*}^{v^*v^*}$: 振動-回転スペクトル強度
J	: 回転量子数 (電子スピン角運動量を含むが、核スピン運動量は含まない)
k	: ボルツマン定数 J/K
\vec{k}	: レーザ進行方向ベクトル
K	: 回転量子数 (電子スピン角運動量は含まない)
Kn	: クヌーセン数
L	: 信号観測長 m
m	: I_2 分子の重量 kg
M_w	: 分子量 g/mol
M	: Mach数

n_0 : 気体の数密度
 N_1 : 下位準位における数密度 m^{-3}
 N_2 : 上位準位における数密度 m^{-3}
 N_{rot}, N_{vib} : v'', J'' 準位の数密度 m^{-3}
 P_0 : よどみ点圧力 Pa
 P_1 : 雰囲気圧力 Pa
 P_1, P_2, P_3 : P ブランチの三重項 (O_2 の場合)
 $P(J'')$: J'' 番目の P ブランチ (PJ'' とも記す)
 $q_{v'v''}$: フランク・コンドン因子
 q_y : 量子収率
 $Q(J'')$: J'' 番目の Q ブランチ (QJ'' とも記す)
 Qu : クエンチングレート
 Q : 分配関数
 $R(J'')$: J'' 番目の R ブランチ (RJ'' とも記す)
 R_1, R_2, R_3 : R ブランチの三重項 (O_2 の場合)
 $S_{F'F''}$: 超微細構造準位間の遷移強度
 $S_{J,J'}$: ヘーネル・ロンドン因子
 S : 電子スピン量子数
 t : 時間 s
 T_e : 電子エネルギー cm^{-1}
 T_{rot}, T_{vib} : 回転温度, 振動温度 K
 T_{tr} : 並進温度 K
 T_0 : よどみ点温度 K
 T_w : ディスク温度 K
 T : 温度 K (T_{rot}, T_{vib}, T_{tr} の総称)
 u : 流速 m/s
 v : 振動量子数
 (v', v'') : $v' \leftrightarrow v''$ 遷移バンド
 W_{12} : 下位準位から上位準位への誘導遷移確率 s^{-1}
 x : ノズルスロート部からの距離
 x_0 : 式 (5.1) 中の定数
 x_M : マッハディスクの位置 m

γ : 比熱比
 $\Delta e Q q$: 四極子モーメントに関する遷移定数 MHz
 ΔJ : $J' - J''$
 $\Delta \nu_n$: 自然幅 (FWHM)
 $\Delta \nu_h$: 衝突幅 (FWHM)
 $\Delta \nu$: 均一幅 ($= \Delta \nu_n + \Delta \nu_h$)
 $\Delta \nu_D$: ドップラ幅 (FWHM)
 $\Delta \nu_{PD}$: 前期解離線幅 (FWHM)
 $\Delta \nu_{DS}$: ドップラシフト周波数 Hz
 $\delta \nu$: レーザ掃引波長ステップ幅 (蛍光信号積算区間)
 $\delta \nu_L$: レーザ線幅 (FWHM)
 θ : スリット集光角
 θ_u : レーザ進行方向と速度方向のなす角 rad
 Λ : 核間方向成分の角運動量量子数
 λ_1, λ_2 : 2 準位モデルにおける固有値
 λ_{MFP} : 平均自由行程
 λ : ハミルトニアン行列の固有値
 ν_0 : スペクトルの中心周波数 Hz
 ν_a : レーザ光と分子の共鳴周波数
 ν : 周波数 Hz
 ν' : 移動分子から見たレーザ光周波数
 σ : 分子直径 Å
 τ_D : 前期解離寿命 s
 τ_P : レーザ持続時間 s
 τ_Q : 分子の平均自由時間 s
 τ_{12} : 上位準位の自然放出寿命 s
 $\phi(\xi)$: 重み関数
 ϕ_0 : 重み関数における定数
 $\phi(\nu)$: スペクトル形状
 $\omega_e, \omega_e x_e, \omega_e y_e, \omega_e z_e, \omega_e a_e$: 振動準位公式の定数

(添字, その他)

ⒶⓈ: 分子内原子の交換に関する対称性

⊕⊖: 分子内電子の交換に対する対称性

i : i 番目のスペクトルに属する量

' : 上位準位の量子数

" : 下位準位の量子数

0 : よどみ点に属する量

a, b : 衝撃波の上流(a), 下流(b)

参考文献

記 号	カ テ ゴ リ
B	真空蒸着装置関連
C	希薄流一般
D	レーザ誘起蛍光法一般
E	O ₂ 分子
F	O ₂ -LIPF
G	自由噴流
H	I ₂ 分子
I	超微細構造
J	I ₂ -LIF
K	K ₂ /Na ₂ 分子
L	K ₂ /Na ₂ -LIF
M	レーザ分光
N	放電を用いた希薄流の可視化
P	その他

B 真空蒸着装置関連

- [B1] 前田, 中村, 伊藤ら, 亜鉛連続真空蒸着めっきラインの開発, 三菱重工技報, vol.24, No.1, 37-43 (1987)
- [B2] 高橋ら, 食品包装フィルム用連続真空蒸着装置の開発, 三菱重工技報, vol.27, No.3, 201-206 (1990)
- [B3] K.Aoki, Y.Sone and T.Yamada, Numerical analysis of gas flows condensing on its plane condensed phase on the basis of kinetic theory, Phys.Fluids, A2(10), 1867-1878 (1990)
- [B4] 曾根, 大和田, 希薄気体力学の基礎的研究, 日本航空宇宙学会誌, 第39巻 450号, 328-341 (1991)
- [B5] 曾根, 杉本, 平面凝縮相からの強い蒸発, 真空, 第31巻, 第5号, 420-423 (1988)
- [B6] 杉本, 曾根, 平面凝縮相からの強い蒸発II, 真空, 第32巻, 第3号, 214-218 (1989)
- [B7] 田口, 狭い二次元流路を通過する低密度気体の流動特性に関する研究, 山口大学大学院工学研究科博士論文 (1995年3月)

C 希薄流一般

- [C1] 希薄気体力学とその先端技術への応用に関する研究分科会成果報告書RC118, 機械学会 (1995)
- [C2] 希薄気体力学とその先端技術への応用, 日本機械学会流体部門協議会調査研究分科会, P-SC201 (1993)
- [C3] W.G.Vincenti and C.H.Kruger, Introduction to Physical Gas Dynamics, Robert E. Krieger Pub. (1965)
- [C4] 丹生, ガス力学, 機械工学大系28, コロナ社 (1974)
- [C5] G.A.Bird, Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows, Clarendon Press (1994)

D レーザ誘起蛍光法一般

(LIF計測法の動向)

- [D1] D.Baganoff, Prospects for Flow Measurements Based on Spectroscopic Methods,

Recent Adv. Aerodyn., 603-630 (1986)

- [D2] J.W.L.Lewis, Optical Diagnostics of Low-Density Flow Fields, Rarefied Gas Dynamics : Physical Phenomena, Vol.117, Progress in Astronautics and Aeronautics, 107-132 (1988)
- [D3] C.Dankert, R.Cattolica and W.Sellers, Local Measurement of Temperatures and Concentrations : A Review for Hypersonic Flows, New Trends in Instrumentation for Hypersonic Research, NATO ASI Series, Kluwer Academic Pub., 563-581 (1993)
- [D4] E.P.Muntz, The electron beam fluorescence technique, AGARDograph 132 (1968)
- [D5] K.L.Carleton, K.H.Welge and S.R.Leone, Detection of nitrogen rotational distributions by resonant 2+2 multiphoton ionization through the $a^1\Pi_g$ state, Chem.Phys.Lett., 115 (6), 492-495 (1985)
- [D6] H.D.Barth, F.Huisken and A.A.Ilyokhin, Coherent Raman Spectroscopy of Nitrogen Molecules and Clusters in Supersonic Jets, Appl.Phys.B52, 84-89 (1991)
- [D7] J.Bittner, K.Kohse-Höinghaus, U.Meier and T.Just, Quenching of Two-Photon-Excited H(3s,3d) and O($3p^3P_{2,1,0}$) Atoms by Rare Gases and Small Molecules, Chem.Phys.Lett., Vol.143, No.6, 571-576 (1988)
- [D8] W.H.Beck, C.Dankert, G.Eitelberg and G.Gundlach, Preliminary Laser-Induced Fluorescence Measurements in Several Facilities in Preparation for Application to Studies in the High Enthalpy Shock Tunnel Göttingen (HEG), 30th Aerospace Sciences Meeting & Exhibit, AIAA 92-0143 (1992)
- [D9] R.A.Copeland, J.B.Jeffries, A.P.Hickman and D.R.Crosley, Radiative Lifetime and quenching of the $3p^4D^o$ state of atomic nitrogen, J.Chem.Phys., 86(9), 4876-4884 (1987)
- [D10] R.L.McKenzie and D.G.Fletcher, Laser-Spectroscopic Measurement Techniques for Hypersonic Turbulent Wind Tunnel Flows, New Trends in Instrumentation for Hypersonic Research, ed.A.Boutier, NATO ASI Series E: Applied Science Vol.224, Kluwer Academic Publishers, 235-244 (1993)
- [D11] R.J.Cattolica, R.L.Schmitt and R.E.Palmer, Feasibility of Non-Intrusive Optical Diagnostic Measurements in Hypersonic Boundary Layers for Flight Experiments, 28th Aerospace Sciences Meeting, AIAA-90-0627 (1990)
- [D12] J.P.Bonnet and D.Gressillon, Advanced non-intrusive experimental techniques in

- fluid and Plasma flows, *Exp. in Fluids*, 12, 131-135 (1991)
- [D13] R.L.McKenzie, Progress in Laser-Spectroscopic Techniques for Aerodynamic Measurements-an Overview, 29th Aerospace Science Meeting, Nevada (1991)
- [D14] R.J.Exton and M.E.Hillar, Raman Doppler velocimetry : a unified approach for measuring molecular flow velocity, temperature and pressure, *App.Opt.*, 25 (1), 14-21 (1986)
- [D15] P.Andresen, Laser Induced Fluorescence Imaging Applications, Lecture Series on Measurement Techniques for Hypersonic Flow, 30-May~1-June, Von Karman Institute, Rhode-Saint-Genese, Belgium (1990)
(エキシマレーザを用いたO₂以外のレーザ誘起蛍光法)
- [D16] C.Dankert and G.Gundlach, Laser-Induced Fluorescence Apparatus for Application in Rarefied Hypersonic Flow Fields : Part I : Static Cell Experiments with NO, DLR Report, DLR-IB222-91A11 (1991)
- [D17] G.Gundlach and J.M.Schramm, Simulation of Laser-Induced Fluorescence Excitation Spectra of Nitric Oxide, DLR Report, DLR-IB222-92A27 (1992)
- [D18] W.H.Beck, C.Dankert, G.Eitelberg and G.Gundlach : AIAA 92-0143, 30th Aerosp. Sci. Meeting & Exhibit (1992)
- [D19] G.Gundlach and C.Dankert, Nonintrusive Temperature Determination by LIF in Hypersonic Wind Tunnels, New Trends in Instrumentation for Hypersonic Research, NATO ASI Series, Kluwer Academic Pub, 361-371 (1993)
- [D20] C.Dankert, G.Gundlach, H.Legge and W.Beck, Temperature measurement in Hypersonic Flow by Laser-Induced Fluorescence, *Rarefied Gas Dynamics : Experimental Techniques and Physical Systems*, ed.B.D.Shizgal and D.P.Weaver, Progress in Astronautics and Aeronautics, vol.158, AIAA, 58-66 (1992)
- [D21] B.K.McMillin et al, Two Dimensional Temperature Measurements of Shock Tube Flows Using Planar Laser Induced Fluorescence Imaging of Nitric Oxide, AIAA 22nd Fluid Dynamics, Plasma Dynamics & Laser Conference, AIAA-91-1670 (1991)
- [D22] J.L.Palmer et al, Planar Laser-Induced Fluorescence Image of Underexpanded Free Jet Flow in a Shock Tunnel Facility, AIAA 22nd. Fluid Dynamics Plasma Dynamics & Laser Conference, AIAA-91-1687 (1991)
- [D23] R.K.Hanson et al, Laser Based Diagnostics for Propulsion and Hypersonics

- Testing, AIAA 16th Aerodynamic Ground Testing Conference AIAA-90-1383 (1990)
- [D24] A.M.Woldtk et al, Simple Way to Improve a Tunable Argon Fluoride Laser, *Rev. Sci.Instrum.*, 60(4), 801. (1989)
- [D25] G.Meijer et al, State-selective detection of CO using a tunable ArF excimer laser, *J.Chem.Phys.*, 89(4), 2588 (1988)
- [D26] R.W.Nicholls, Franck-Condon Factors to high vibrational quantum numbers IV : NO band system, *J.Res.Nat.Bur.Stand. -A* 68A(5) 535-540 (1964)
- [D27] R.J.M.Bennett, Hönl-London Factors For Doublet Transitions in Diatomic Molecules, *Mon.Not.R.Astr.Soc.*, 147, 34-46 (1970)
- [D28] L.T.Earls, Intensities in Transition in Diatomic Molecules, *Phys.Rev.* 48, 432-424 (1935)
- [D29] H.Zacharias, M.M.T.Loy, P.A.Roland and A.S.Sudbo, Rotational and Electronic Relaxation in Pulsed Supersonic beams of NO seeded in He and Ar, *J.Chem.Phys.*, 81(7), 3148 (1984)
- [D30] J.Segner, H.Robota et al, Rotational State Populations of NO Molecules Scattered from Clean and Adsorbate-Covered Pt(111) Surface, *Surface Science*, 131, 273-289 (1983)
- [D31] K.Shibuya and F.Stuhl, Fluorescence Lifetime and Collisional Quenching of the predissociative NO $B^2\Pi(v'=7)$ State, *Chem.Phys.*, 79, 367-381 (1983)
- [D32] J.M.Seitzman, Instantaneous temperature fields measurements using planar laser Induced Fluorescence, *Opt.Lett.*, vol.10, No.9, 439 (1985)
- [D33] G.Gundlach, Untersuchung der Rotations-energie-Wechselwirkung von NO an technischen Oberflächen in verdünnter Hyperschallströmung mit laserinduzierter Fluoreszenz, DLR Forschungsbericht 95-38 (1995)
(biacetylを用いたレーザ誘起蛍光法)
- [D34] B.Hiller, R.A.Booman, C.Hassa and R.K.Hanson, Velocity visualization in gas flows using laser-induced phosphorescence of biacetyl, *Rev.Sci.Instrum.*, 55(12), 1964-1967 (1984)
- [D35] H.W.Sidebottom, C.C.Badcock, J.G.Calret, B.R.Rade and E.K.Damon, Lifetime Studies of the Biacetyl Excited Singlet and Triplet States in the Gas Phase at 25°, *Journal of the American Chemical Society*, 94:1, 13-19 (1972)

- [D36] G.M. Almy and P.R. Gillette, The Quantum yield of Diacetyl Fluorescence, *J. Chem. Phys.*, 11, 188-195 (1943)
- [D37] H. Okabe and W.A. Noyes, Jr, The Relative Intensities of Fluorescence and Phosphorescence in Biacetyl Vapor, *J. Am. Chem. Soc.*, 79, 801-806 (1957)
- [D38] A.H. Epstein, Quantitative Density Visualization in a Transonic Compressor Rotor, *J. Engineering for Power*, ASME, 460-474 (1977)

E O₂ 分子

- [E1] P.H. Krupenie, The spectrum of Molecular Oxygen, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 1, 423-534 (1972)
- [E2] A.S.-C. Cheung, K. Yoshino, W.H. Parkinson and D.E. Freeman, Herzberg Continuum Cross Section of Oxygen in the Wavelength Region 193.5-204.0nm and Band Oscillator Strengths of the (0,0) and (1,0) Schumann-Runge bands, *Can. J. Phys.*, 62, 1752-1762 (1984)
- [E3] A.S.-C. Cheung, K. Yoshino, W.H. Parkinson and D.E. Freeman, Molecular Spectroscopic Constants of O₂ ($B^3\Sigma_u^-$): The Upper State of the Schumann-Runge Bands, *J. Mol. Spectrosc.*, 119, 1-10 (1986)
- [E4] D.M. Creek and R.W. Nicholls, A Comprehensive Re-Analysis of the O₂ Schumann-Runge Band System, *Proc. R. Soc. London A*, 341, 517-536 (1975)
- [E5] R. Harris, M. Blackledge and J. Generosa, Rydberg-Klein-Rees(RKR) Franck-Condon Factors for the O₂-Schumann-Runge System Including High Vibration Quantum Numbers, *J. Mol. Spectrosc.*, 30, 506-512 (1969)
- [E6] J.B. Tatum, Hönl-London Factors for $^3\Sigma^+ - ^3\Sigma^+$ Transitions, *Can. J. Phys.*, 44, 2944-2946 (1966)
- [E7] K. Yoshino, D.E. Freeman and W.H. Parkinson, Atlas of the Schumann-Runge Absorption Bands of O₂ in the Wavelength Region 175-205nm, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 13, 207-227 (1984)
- [E8] M. Ackerman and F. Biau, Structure of the Schumann-Runge Bands from the 0-0 to the 13-0 band, *J. Mol. Spectrosc.*, 35, 73-82 (1970)
- [E9] L. Veseth and A. Lofthus, Fine Structure and Centrifugal Distortion in the

Electronic and Microwave Spectra of O₂ and SO, *Mol. Phys.*, Vol. 27, No. 2, 511-519 (1974)

- [E10] P.S. Julienne and M. Kraus, Predissociation of the Schumann-Runge Bands of O₂, *J. Mol. Spectrosc.*, Vol. 56, 270-308 (1975)
- [E11] B.R. Lewis et al, Rotational Variation of Predissociation Linewidth in the Schumann-Runge Bands of O₂, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, Vol. 36, No. 3, 187 (1986)
- [E12] D.L. Albritton et al, Resolution of the Discrepancies Concerning the Optical and Microwave values for B_v and D_v of the $X^3\Sigma_g^-$ State of O₂, *J. Mol. Spectrosc.*, 46, 103 (1973)
- [E13] J.F. Frederick et al, Predissociation Linewidths and Oscillator Strength for the (2-0) to (13-0) Schumann-Runge Bands of O₂, *J. Mol. Spectrosc.*, 74, 247 (1979)
- [E14] P.B. Kelly and B.S. Hudson, Resonance Fluorescence and Resonance Spectra of Molecular Oxygen, *Chem. Phys. Lett.*, Vol. 114, No. 56, 451 (1985)
- [E15] K. Yoshino et al, High Resolution Absorption Cross Section Measurements and Band Oscillator Strength of the (1,0)-(12,0) Schumann-Runge Bands of O₂, *Planet. Space. Scie.*, vol. 31, No. 3, 339 (1983)
- [E16] T.H. Bergeman and S.C. Wofsy, The fine Structure of O₂ ($B^3\Sigma_u^-$), *Chem. Phys. Lett.*, vol. 15, No. 1, 104 (1972)
- [E17] M.W.P. Cann et al, High Resolution atmospheric transmission calculations down to 28.7km in the 200-243nm spectral Range, *Appl. Opt.*, vol. 18, No. 7, 964 (1979)
- [E18] P.L. Smith et al, Interstellar O₂ II VUV Oscillator Strengths of Schumann-Runge Lines and Prospects for Space Telescope Observations, *Astrophys. J.* 277, 569 (1984)
- [E19] R.D. Hudson et al, Photodissociation Rates of Molecular Oxygen in the Mesosphere and Lower Thermosphere, *J. Geophys. Research*, Vol. 77, No. 16, 2902 (1972)
- [E20] V. Hasson et al, Measured transition probabilities for bands of the Schumann-Runge band system of molecular oxygen, *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.*, Vol. 3, 1188 (1970)
- [E21] M. Jeunehomme, Oscillator Strengths of the Negative Systems of Oxygen, *J. Chem. Phys.*, 44(11), 4253-4258 (1966)

- [E22] A.M.Wodtke, L.Huwel, H.Schüter, H.Voges, G.Meijer and P.Andresen, Predissociation of O_2 in the B state, J.Chem.Phys., 89(4), 1929-1935 (1988)
- [E23] A.C.Allison, A.Dargarno and N.W.Pasachoff, Absorption by Vibrationally Excited Molecular Oxygen in the Schumann-Runge Continuum, Planet.Space.Sci, Vol.19, 1463-1473 (1971)
- [E24] M.W.P.Cann, J.B.Shin and R.W.Nicholls, Oxygen absorption in the spectral range 180-300nm for temperatures to 3000K and pressures to 50atm, Can.J.Phys., 62, 1738-1751 (1984)

F O_2 - L I P F

- [F1] 石田, 新見ら, O_2 -LIPFによる超音速流れの可視化, 機論B, 60-577, 3051-3057 (1994)
- [F2] 石田, 中山, O_2 -LIPFによる超音速流れの可視化 第2報, 機論B (出版予定)
- [F3] G.A.Massey and C.J.Lemon, Feasibility of Measuring Temperature and Density Fluctuations in Air Using Laser Induced O_2 Fluorescence, IEEE J.Quant. Electronics, QE-20, No5, 454-457 (1984)
- [F4] P.Andresen, G.Meijer, H.Schlueter, H.Voges, A.Koch, W.Hentschel, W.Oppermann and E.Rothe, Fluorescence Imaging Inside an Internal Combustion Engine Using Tunable Excimer Lasers, Applied Optics, Vol.29, No16, 2392-2404 (1990)
- [F5] P.Andresen, A.Bath, W.Groeger, J.W.Luelf, G.Meijer and J.J.ter Meulen, Laser Induced Fluorescence with Tunable Excimer Lasers as a Possible Method for Instantaneous Temperature Field Measurements at High Pressures: Checks with an Atmospheric Flame, Applied Optics, Vol.27, No2, 365-378 (1988)
- [F6] M.P.Lee and R.K.Hanson, Calculations of O_2 Absorption and Fluorescence at Elevated Temperatures for a Broadband Argon-Fluoride Laser Source at 193nm, J.Quant.Spectros.Radiat.Transfer, Vol.36, No5, 425-440 (1986)
- [F7] M.P.Lee, P.H.Paul and R.K.Hanson, Laser fluorescence imaging of O_2 in combustion flows using an ArF laser, Opt.Lett. 11(1), 7-9 (1986)
- [F8] M.P.Lee, P.H.Paul and R.K.Hanson, Quantitative imaging of temperature fields in air using planar laser-Induced Fluorescence of O_2 , Opt.Lett., Vol.12, No2, 75

(1978)

- [F9] L.M.Cohen, M.P.Lee, P.H.Paul and R.K.Hanson, Two-Dimensional Imaging Measurements In Supersonic Flows Using Laser-Induced Fluorescence of Oxygen, AIAA 22nd Thermophysics Conference, June8-10, 1987/Honolulu, Hawaii, AIAA-87-1527 (1987)
- [F10] L.C.Philippe and R.K.Hanson, Tunable Diode Laser Absorption Sensor for Temperature and Velocity Measurements of O_2 in Air Flows, 29th Aerospace Sciences Meeting, AIAA-91-0360 (1991)
- [F11] K.Shibuya and F.Stuhl, Single Vibronic Emissions from NO $B^2\Pi(v'=7)$ and O_2 $B^3\Sigma_u^-(v'=4)$ Excited by 193nm ArF Laser, J.Chem.Phys., 73(2), 15, 1184-1186 (1982)
- [F12] G.Laufer and R.L.McKenzie, Temperature Measurements in Hypersonic Air Flows Using Laser-Induced O_2 Fluorescence, AIAA/NASA/AFWAL Conference on Sensor and Measurement Techniques for Aeronautical Applications, AIAA-88-4679-CP (1988)
- [F13] G.Laufer, R.L.McKenzie and W.M.Huo, Radiative process in air excited by an ArF laser, Opt.Lett., Vol.13, No2, 99-101 (1988)
- [F14] G.Laufer, D.Fletcher and R.L.McKenzie, A Method for Measuring Temperatures and Densities in Hypersonic Wind Tunnel Air Flows using Laser-Induced O_2 Fluorescence, 28th Aerospace Science Meeting, AIAA-90-0626 (1990)
- [F15] G.Laufer, R.L.McKenzie and D.G.Fletcher, Methods for measuring temperatures and densities in hypersonic wind tunnel air flow using laser-induced O_2 fluorescence, Vol.29(33), Appl.Opt., 4873 (1990)
- [F16] D.G.Fletcher and R.L.McKenzie, Simultaneous Measurements of Temperature and Density in Air Flows Using UV Laser Spectroscopy, AIAA-91-0458, 29th Aerospace Science Meeting, Nevada (1991)

G 自由噴流

- [G1] H.Legge, DLR Bericht IB 222-86 A15 (1986)
- [G2] H.Legge, DLR Bericht 69 A26 (1969)
- [G3] D.Coe, F.Robben, L.Talbot and R.Cattolica, Proc.11th Int.Symp.RGD, 907-918

(1978)

- [G4] H. Legge, Hyperschallströmung geringer Dichte an stumpfen Körpern, DLR Bericht
- [G5] H. Ashkenas and F. S. Sherman, The Structure and Utilization of Supersonic Free Jets in Low Density Wind Tunnel, Rarefied Gas Dynamics, Vol. 2, ed. by J. H. deLeeuw, Academic Press, 84-105 (1966)
- [G6] Cattolica et al, Translational nonequilibrium in free jet expansions, Physics of Fluids, 17-10, 1793-1807 (1974)
- [G7] N. Takahashi and K. Teshima, Numerical Analysis of Free Jet Expansion of a Binary Gas Mixture, Rarefied Gas Dynamic, Vol. 2, ed. by H. Oguchi, Tokyo Univ. Press, 703-710 (1984)
- [G8] C. Dankert, K.-A. Bütetisch, Influence of Nozzle Geometry on Vibrational Relaxation in an Expansion Flow, Rarefied Gas Dynamics, 9th Symposium, Göttingen, B20-1 (1974)
- [G9] G. M. McClelland, K. L. Saenger, J. J. Valentin and D. R. Herschbach, Vibrational and Relaxation of Iodine in Seeded Supersonic Beams, J. Phys. Chem., 83(8), 947-959 (1979)
- [G10] Atomic and Molecular Beam Methods, ed. G. Scoles, Oxford University Press, 46 (1988)
- [G11] Crist et al, AIAA 4(1), 68 (1966)

H I₂ 分子

- [H1] P. Luc, Molecular Constants and Dunham Expansion Parameters Describing the B-X System of Iodine Molecule, J. Mol. Spectrosc., 80, 41-55 (1980)
- [H2] J. Tellinghuisen, Intensity Factors for the I₂ B \leftrightarrow X Band System, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, Vol. 19, 149-161 (1978)
- [H3] G. A. Capelle et al, Lifetimes and quenching cross sections of I₂ (B³Π_{ou}⁺), J. Chem. Phys., Vol. 58, No. 10, 4212 (1973)
- [H4] S. Gerstenkorn and P. Luc, Atlas du spectra d'absorption de la molécule d'iode, Editions du CNRS, Paris (1978)
- [H5] R. F. Barrow and K. K. Yee, B²Π_{ou}⁺ - X¹Σ_g⁺ System of ¹²⁷I₂ : Rotational Analysis and

Long Range Potential in the B³Π_{ou}⁺ State, J. Chem. Soc. Faraday Trans. II, 684-700 (1973)

- [H6] J. Wei and J. Tellinghuisen, Parameterizing Diatomic Spectra: "Best" Spectroscopic Constants for the I₂ B \leftrightarrow X Transitions, J. Mol. Spectrosc., 50, 317-332 (1974)
- [H7] G. D. Patterson et al, Resonance Fluorescence of I₂ at 5145 Å, J. Mol. Spectrosc., 55, 175 (1975)
- [H8] S. Gerstenkorn et al, Rotational Analysis of the 5350 Å Band of Iodine by Means of Fourier Transform Spectroscopy, J. Mol. Spectrosc., 64, 56-59 (1977)
- [H9] J. B. Koffend et al, Continuous Wave Optically Pumped Iodine Laser Spectroscopy and Long Range Analysis of the X¹Σ_g⁺ Ground State of I₂, J. Mol. Spectrosc., 77, 202 (1979)
- [H10] S. Gerstenkorn et al, Assignments of Several Groups of Iodine(I₂) Lines in the B-X System, J. Mol. Spectrosc., 77, 310 (1979)
- [H11] R. J. LeRoy, Dependence of the Diatomic Rotational Constant B_v on the Long-Range Internuclear Potential, Can. J. Phys., 50, 953-959 (1972)
- [H12] J. D. Brown, G. Bruns and R. J. LeRoy, Improved Spectroscopic data Synthesis for I₂ (B³Π_{ou}⁺) and Predictions of J Dependence for B (B³Π_{ou}⁺) - X (¹Σ_g⁺) Transition Intensities, Can. J. Phys., 51, 1664-1677 (1973)
- [H13] R. J. LeRoy, Long-Range Potential Coefficients from RKR Turnig Points : C₀ and C₈ for B³Π_{ou}⁺ - State Cl₂, Br₂ and I₂, Can. J. Phys., 52, 246-256 (1974)
- [H14] R. D. Verma, Ultraviolet Resonance Spectrum of Iodine Molecule, J. Chem. Phys., 32(3), 738-749 (1960)
- [H15] R. J. LeRoy, Spectroscopic Reassignment and Ground-State Dissociation Energy of Molecular Iodine, J. Chem. Phys., 52(5), 2678-2682 (1970)
- [H16] R. J. LeRoy, Molecular Constants and Internuclear Potential of Ground-State Molecular Iodine, J. Chem. Phys., 52(5), 2683-2689 (1970)
- [H17] S. M. Singh and J. Tellinghuisen, The visible Emission Spectrum of Iodine, J. Mol. Spectrosc., 47, 409-419 (1973)
- [H18] J. Tellinghuisen, Resolution of the visible-infrared absorption spectrum of I₂ into three contributing transition, J. Chem. Phys., 58(7), 2821-2834 (1973)
- [H19] J. I. Steinfeld, R. N. Zare, L. Jones, M. Lesk and W. Klemporer, Spectroscopic Constants

- and Vibrational Assignment for the $B^3\Pi_{ou}^+$ State of Iodine, J.Chem.Phys., 42(1), 25-33 (1965)
- [H20] J. I. Steinfeld, J. D. Campbell and N. A. Weiss, Spectroscopy of I_2 at the Dissociation Limit, J. Mol. Spectrosc., 29, 204-215 (1969)
- [H21] W. Stwally, On LeRoy's Spectroscopic Assignment of a O_g^+ State in Molecular Iodine, J. Chem. Phys., 56(1), 680-681 (1972)
- [H22] D. H. Rank and B. S. Rao, Molecular Constants of the Ground State of I_2 , J. Mol. Spectrosc., 13, 34-42 (1964)
- [H23] P. F. Williams, D. L. Rousseau, S. H. Dworesky, Resonance Fluorescence and Resonance Raman Scatterig:Lifetimes in Molecular Iodine, Phys. Rev. Lett., 32(5), 196-199 (1974)
- [H24] D. H. Rank, Resonance Spectrum of Iodine, J. Opt. Soc. Am., Vol. 36, 239-241 (1946)
- [H25] W. Kiefer and H. J. Bernstein, Vibrational-Rotational Structure in the Resonance Raman Effect of Iodine Vapor, J. Mol. Spectrosc., 43, 366-381 (1972)
- [H26] D. H. Rank and W. M. Baldwin, Molecular Constants of the Ground State of the I_2 Molecule, J. Chem. Phys., 19, 1210-1211 (1951)
- [H27] J. Chevalerey, J. P. Perrot, J. M. Chastan, S. Valigt et al, Study and Assignment of Ion Pair State of the I_2 Molecule in the 40000cm^{-1} Region, Chem. Phys., 67, 59-64 (1982)
- [H28] R. N. Zare, J. Chem. Phys., 40(7), 1934-1944 (1964)

I 超微細構造

- [I1] A. Levinger, N. Katzenellenbogen and Y. Prior, High-resolution Hyperfine Spectroscopy in real Space, Opt. Lett., 15(11), 625-627 (1990)
- [I2] A. Levinger and Y. Prior, High resolution spectroscopy of molecules in Supersonic Jets, J. Chem. Phys., 94(2), 1664-1666 (1991)
- [I3] M. D. Levenson and A. L. Schawlow, Hyperfine Interactions in Molecular Iodine, Phys. Rev. A., 6(1), 10-20 (1972)
- [I4] D. J. Ruben, S. G. Kukolich, L. A. Hackel, D. G. Youmans and S. Ezekiel, Laser Molecular Beam Measurement of Hyperfine Strucure in the I_2 Spectrum, Chem. Phys. Lett., 22, 326-330 (1973)
- [I5] M. Kroll and K. K. Innes, Molecular Electronic Spectroscopy by Fabry-Perot Interferometry Effect of Nuclear Quadrupole Interaction on the Line Widths of the $B^3\Pi_{ou}^+ - X^1\Sigma_g^+$ Transtition of the I_2 Molecule, J. Mol. Spectrosc., 36, 295-309 (1970)
- [I6] J. S. Rigden, Nuclear-Quadrupole Effect on Rotational Levels of a Molecule with two Nuclei Having Spins of $5/2$, J. Chem. Phys., 44(12), 4603-4611 (1966)
- [I7] T. W. Hänsch, M. D. Levenson and A. L. Schawlow, Complete Hyperfine Structure of a Molecular Iodine Line, Phys. Rev. Lett., 26(16), 946-949 (1971)
- [I8] D. G. Youmans, L. A. Hackle and S. Ezekiel, High-resolution spectroscopy of I_2 using Laser molecular-beam techniques, J. Appl. Phys., 44(5), 2319-2321 (1973)
- [I9] M. Kroll, Hyperfine Structure in the Visible Molecular-Iodine Absorption Spectrum, Phys. Review. Lett., Vol. 23(12), 631-633 (1969)
- [I10] M. S. Sorem, T. W. Hänsch and A. L. Schawlow, Nuclear Quandrupole Coupling in the $^1\Sigma_g^+$ and $^3\Pi_{ou}^+$ states of Molecular Iodine, Chem. Phys. Lett., Vol. 17(2), 300-302 (1972)
- [I11] J. T. Latourrette, R. S. Eng, Hyperfine Strucure of I_2 and Br_2 Near 6328\AA by Laser Saturated Absorption Spectroscopy, IEEE. J. Quantum Electron. QE-8, 561 (1972)
- [I12] L. A. Haekel, K. H. Casleton, S. G. Kukolich and S. Ezekiel, Observation of Magnetic Octupole and Scalar Spin-Spin Interactions in I_2 Using Laser Spectroscopy, Phys. Rev. Lett., 35(9), 568-571 (1975)
- [I13] G. R. Hanes, J. Lapierre, P. R. Bunker and K. C. Shotton, Nuclear Hyperfine Structure

in the Electronic Spectrum of $^{127}\text{I}_2$ by Saturated Absorption Spectroscopy, and Comparison with Theory, J.Mol.Spectrosc., 39, 506-515 (1971)

[I14] G.R.Hanes, C.E.Dahlstrom, Iodine Hyperfine Structure observed in Saturated Absorption at 633nm, Applied Phys.Lett., 14(11), 362-364 (1969)

[I15] H.M.Foley, Note on the Nuclear Electric Quadrupole Spectrum of a Homonuclear Diatomic Molecule in a Magnetic Field, Phys.Rev., 71(11), 747 (1947)

[I16] G.W.Robinson and C.D.Cronwell, The Interaction with Molecular Rotation of the Nuclear Electric Quadrupole Moments of Two Nuclei Having Spins 3/2, J.Chem. Phys., 21(9), 1436-1442 (1953)

[I17] C.H.Townes and B.P.Dailey, Nuclear Quadrupole Effects and Electronic Structure of Molecules in the Solid State, J.Chem.Phys., 20(1), 35-40 (1952)

J I_2 - L I F

[J1] 藤本, 新美, 自由噴流の干渉に関する研究, 機論B, 53巻, 486号, 400 (1987)

[J2] T.Niimi and J.Fuijimoto, Planar Measurement of Temperature in Rarefied Gas Flows by LIF Images, 17th RGD, 1482 (1990)

[J3] 新美, 藤本, 近藤, 清水, LIFによる可視化画像を用いた希薄気体流の温度計測法の開発, 機論B 56-529, 2608-2615 (1990)

[J4] 新美, 藤本, 若山, 石田, PLIFによる希薄気体流の温度計測, 機論B 58-555, 3275-3279 (1982)

[J5] 手島, レーザ誘起蛍光法による超音速噴流の可視化, レーザ研究, 第12巻, 第11号, 614-623 (1984)

[J6] 手島, 自由噴流と分子線, 真空, 第30巻, 第1号, 5-13 (1987)

[J7] K.Teshima and M.Sommerfeld, Visualization and Numerical Simulation of supersonic microjets, Experiments in Fluids, 5, 197-200 (1987)

[J8] 大場, レーザ誘起蛍光法による流れの可視化, 流れの可視化, Vol.7, No.25, 7 (1987)

[J9] W.J.Hiller and J.Hägele, Visualization of Hypersonic Micro-Jet By Laser Induced Fluorescence, Int.Symp.on Flow Visualization, 486 (1980)

[J10] B.Hiller and R.K.Hanson, Properties of the iodine molecule relevant to laser-induced fluorescence experiments in gas flows, Experiments in Fluids, 10, 1-11

(1990)

[J11] J.C.McDaniel, Quatitative Measurement of Density and Velocity in Compressible Flows Using Laser-Induced Iodine Fluorescence, AIAA Paper 83-0049 (1983)

[J12] J.C.McDaniel, Nonintrusive Pressure Measurements with Laser-Induced Iodine Fluorescence, Prog.Astronaut.Aeronaut, vol.92, 107-131 (1984)

[J13] D.G.Fletcher and J.C.McDaniel, Temperature Measurement in a compressible flow field using laser-induced iodine fluorescence, Opt.Lett., Vol.12, No.1, 16-18 (1987)

K K_2 / Na_2 分子

[K1] C.Amiot, The $X^1\Sigma_g^+$ Electronic State of K_2 , J.Molecular Spectroscopy, 370-382 (1991)

[K2] S.Bashkin et al, Atomic Energy-Level and Grotrian Diagrams, Vol. II, North-Holland Pub.Co., 280 (1978)

[K3] R.Düren et al, Differential Cross Section for Fine-Structure Inelastic Collisions of $\text{K}(4^2P)$ with Ar, Kr and N_2 , Chem.Phys.Lett., Vol.112, No.5, 441-443 (1984)

[K4] Gmelines Handbuch der Anorganischen Chemie, Kalium, No.22, Verlag-Chemie GmbH (1936)

[K5] L.C.Lewis, Die Bestimmung des Gleichgewichts zwischen den Atomen und den Molekulan eines Alkalidampfes mit einer Molekularstrahlmethode, Z.Phys., 69, 786-809 (1931)

[K6] K.Neumann, E.Völker, Eine Drehwaagemethode zur Messung kleiner Dampfdrucke, Z.Phys.Chem, Abt.A161, 33-45 (1932)

[K7] A.Carrelli, P.Pringsheim, Die Bildungswärme der K_2 -Moleküle, Z.Phys., 44, 643-652 (1927)

[K8] R.W.Dichtburn, The Continuous Absorption of light in Potassium Vapor, Proc. Roy.Soc.A117, 486-508 (1928)

[K9] J.M.Walter and S.Barratt, The Existence of Intermetallic Compounds in Vapour State, Proc.Roy.Soc.A119, 257-275 (1928)

[K10] F.W.Loomis and R.E.Nusbaum, Magnetic Rotation Spectrum and Heat of Dissociation

of the Pottassium Molecule, Phys.Rev., 39, 89-98 (1932)

L $K_2/Na_2 - LIF$

- [L1] J.A.Silver, Measurement of atomic sodium and potassium diffusion coefficients, J.Chem.Phys., Vol.81, No.11, 5125-5130 (1984)
- [L2] K.H.Meiwes et al, Predissociation of K_2 : Molecular Beam-Laser-Induced Fluorescence Spectroscopy of the $C^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ Band System, Chem.Phys.Lett., Vol.85, No.4, 409-414 (1982)

M レーザ分光

- [M1] A.A.Radzig and B.M.Smirnov, Reference Data on Atoms, Molecules, and Ions, Springer Series in Chemical Physics Vol.31, Springer (1985)
- [M2] W.Demtröder, Laser Spectroscopy-Basic Concepts and Instrumentation, Springer Series in Chemical Physics Vol.5, Springer (1982)
- [M3] M.D.Levenson, Introduction to Nonlinear Laser Spectroscopy, Academic Press (1982)
- [M4] G.Herzberg, 原子スペクトルと原子構造, 堀健夫訳, 丸善 (1964)
- [M5] G.Herzberg, Molecular Spectra and Molecular Structure, I. Spectra of Diatomic Molecules, Van Nostrand Reinhold Co. (1950)
- [M6] G.Herzberg, Molecular Spectra and Molecular Structure, IV Constants of Diatomic Molecules, Van Nostrand Reinhold Co. (1979)
- [M7] E.U.Condon and G.H.Shortley, The Theory of Atomic Spectra, Cambridge Univ.Press., (1935)
- [M8] S.S.Penner, Quantitative Molecular Spectroscopy and Gas Emissivities, Addison-Wesley Pub.Co., (1959)
- [M9] J.I.Steinfeld, An Introduction to Modern Molecular Spectroscopy, 2nd.ed., MIT Press (1985)
- [M10] A.Yariv, Quantum Electronics, 2nd.ed., John Wiley & Sons (1975)
- [M11] 片山, レーザ化学(II), 裳華房 (1985)
- [M12] 土屋編, レーザ化学, 学会出版センタ (1984)

[M13] 中原編, 分光測定入門, 学会出版センタ (1987)

[M14] A.Yariv, 光エレクトロニクスの基礎, 多田他訳, 丸善 (1988)

[M15] K.E.Johnson, L.Wharton and D.H.Levy, The Photodissociation lifetime of the van der Waals molecule I_2He , J.Chem.Phys., 69(6), 2719-2724 (1978)

[M16] R.P.Lucht and N.M.Laurendeau, Two-level model for near saturated fluorescence in diatomic molecules, Applied Optics, Vol.18, No.6, 856-861 (1979)

[M17] M.J.Cottrean, Single-shot laser-saturated fluorescence measurements: a new method, Appl.Opt., 25(5), 744-748 (1985)

[M18] R.C.Hilborn, Einstein Coefficients, cross section, f-values, dipole moments and all that, Am.J.Phys., 50(11), 982-986 (1982)

[M19] R.E.Smalley, D.H.Levy and L.Wharton, The fluorescence excitation spectrum of the HeI_2 van der Waals complex, J.Chem. Phys. 64(8), 3266-3276 (1976)

[M20] C.H.Towns and A.L.Schawlow, Microwave Spectroscopy, Dover Pub. Inc. (1975)

[M21] H.E.White, Introduction to Atomic Spectra, McGRAW-HILL BOOK Co. (1934)

N 放電を用いた希薄流の可視化

- [N1] Ch.-H.Chun, Hypersonic Rarefied Flow about a Compression Corner DSMC Simulation and Experiment, AIAA 26th Thermophysics Conference, 1-21 (1991)
- [N2] Ch.-H.Chun, DFVLR-IB 222-89 A11 (1989)
- [N3] 本多, 気体放電現象, 東京電機大学出版局 (1964)
- [N4] RF励起および混合気体中非平衡プラズマの物性, 電気学会技術報告II部第291号 (1989)
- [N5] 新版流れの可視化ハンドブック, 朝倉書店 (1986)

P その他

- [P1] W.H.Press, B.P.Flannery, S.A.Teukolsky and W.T.Vetterling, Numerical Recipes in C, Cambridge University Press (1988)
- [P2] リープマン・ロシュコ, 気体力学, 玉田 訳, 吉岡書店 (1960)

Appendix

Appendix 1 : フランク・コンドン因子の理論的計算法

Appendix 2 : 超微細構造の強度計算式の導出

Appendix 3 : O_2 シューマン・ルンゲ・バンドのシミュレーションコード

Appendix 4 : ArF^* エキシマレーザ波長に含まれる

O_2 シューマン・ルンゲ・バンドのブランチリスト

Appendix 5 : O_2 の $X^3\Sigma_g^-$ 及び $B^3\Sigma_u^-$ の振動・回転準位

Appendix 6 : I_2 の B-X バンド・シミュレーションコード

Appendix 7 : I_2 の B-X バンドにおけるバンド位置

Appendix 8 : I_2 のハミルトニアン固有値計算コード

Appendix 1 : フランク・コンドン因子の理論的計算法

フランク・コンドン因子は遷移準位間の波動関数状態が共鳴状態にあるか否かの程度を示す指数であり、因子が大きい場合共鳴しやすく、遷移も起こりやすいことを意味する。本Appendixではよう素分子(I_2)を例にとって、2原子分子に対するフランク・コンドン因子の計算法を示す。

1. 基礎式

1.1 波動関数の解析

計算にあたっての仮定は次のとおりである。

(仮定1)

分子は2原子分子とする。(図A1.1)

図A1.1において、

m_1, m_2 : 原子の質量[kg]

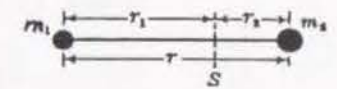
r : 原子間距離[m]

r_1, r_2 : 重心からの距離[m]

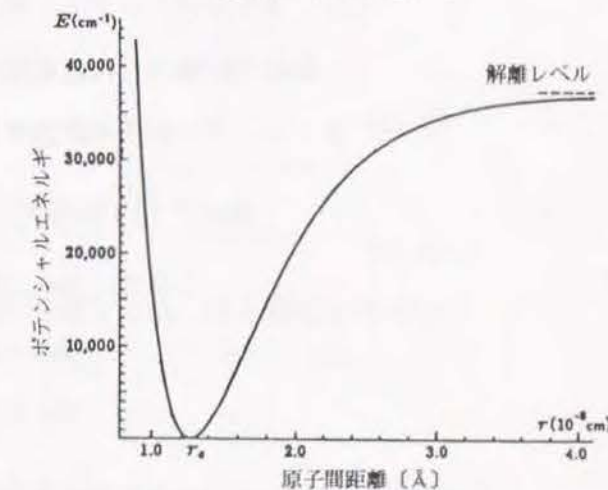
S : 重心[-]

(仮定2)

分子のポテンシャルは図A1.2の実線で示す非調和振動子として近似する。



図A1.1 Dumbbell Model of a Diatomic Molecule



図A1.2 非調和振動子のポテンシャル形状の一例

以上の仮定のもとで、解くべきShrödinger波動方程式は、

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{8\pi^2 \mu}{h^2} (E - U(x)) \phi = 0 \quad (A1.1)$$

ここで、 ϕ : 波動関数 [-]

$$\mu : \text{reduced mass [kg]} = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

h : プランクの定数 [J・s] = $6.6260755 \times 10^{-34}$ [J・s]

E : 振動エネルギー固有値 [J]

U : ポテンシャルエネルギー [J]

x : 原子間距離 [m]

解の規格化から ϕ は次式を

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_n \phi_m = \delta_{nm} \quad (\text{A1.2})$$

満足する解とする。

(式A1.1)中の振動エネルギー固有値は、

$$E = G(v) = \omega_e \left(v + \frac{1}{2} \right) - \omega_e x_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 + \omega_e y_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^3 \quad (\text{A1.3})$$

ここで、 $G(v)$: 振動エネルギー [J]

v : 振動量子数 [-]

$\omega_e, \omega_e x_e, \omega_e y_e$: 振動エネルギー定数 [J]

(式A1.1)を解くための境界条件は、

$$\left. \begin{array}{l} x \rightarrow 0 : \phi = \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \\ x \rightarrow \infty : \phi = \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \end{array} \right\} \quad \text{Ar*ab I}_2\text{-LIF法} \quad (\text{A1.4})$$

1.2 フランク・コンドン因子の解析

前節で計算された波動関数 ϕ より、振動準位間の遷移強度を示す因子である、フランク・コンドン因子を計算する。フランク・コンドン因子は次式で計算される^[M5]。

$$q_{v'v''} = \left\{ \int_0^{\infty} \phi_{v'} \phi_{v''} dx \right\}^2 \quad (\text{A1.5})$$

ここで、 $q_{v'v''}$: 振動準位 v' と v'' の間のフランク・コンドン因子 [-]

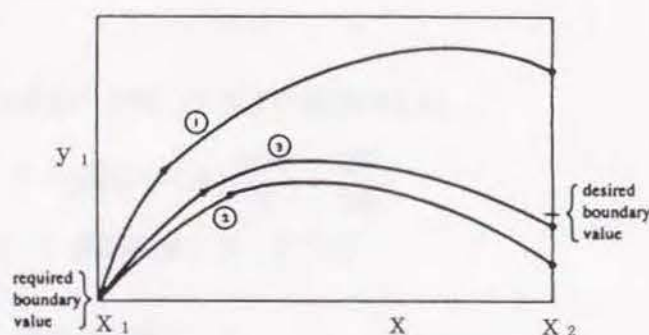
$\phi_{v'}$: 上位準位の波動関数 [-]

$\phi_{v''}$: 下位準位の波動関数 [-]

2. 数値解法

(式A1.1)については、 U が調和振動子の場合、解析解が知られているが、 U が任意形状の場合、数値解しか得ることが出来ない。

(式A1.1)は2階の常微分方程式であり、一般に常微分方程式の境界値問題にはShooting methodが適する^[P1]。



図A1.3 Shooting method

図A1.1にShooting methodの概念を示す。(A1.1)式を2つの1階常微分方程式

$$\frac{dy_1}{dx} = y_2 \quad (\text{A1.6})$$

$$\frac{dy_2}{dx} = -\frac{8\pi\mu}{h^2} (E - U(x)) y_1 \quad (\text{A1.7})$$

に分解し、連立1階常微分方程式の初期値問題を解く。このとき方程式数 $N=2$ であり、 x_1 において不定の初期値である y_2 の値 V_1 と(式A1.3)で示される E が厳密に(式A1.1)の固有値となる為の E の補正值 V_2 を不定の初期値ベクトル V とみなし(本節末の注参照)、 x_2 において $y_1 = y_2 = 0$ (境界条件)を満足するように V の収束解を求める。 x_2 におけるdiscrepancy vector F

$$F_1 = y_1^{[N]}(x_2) - 0$$

$$F_2 = y_2^{[N]}(x_2) - 0$$

ここで、 $y_1^{[N]}, y_2^{[N]}$: くり返しN回目の $x = x_2$ における値

を用いて、

$$\left[\frac{\partial F_i}{\partial V_j} \right]^{[N]} \delta V^{[N+1]} = -F^{[N]} \quad (\text{A1.8})$$

を解くことにより、

$$V^{[N+1]} = V^{[N]} + \delta V^{[N+1]} \quad (\text{A1.9})$$

によって V を収束計算する。本報の計算で(A1.8)を解くには、LU分解法を用いた。プログラム言語としてPASCALを用い計算した。

(x_1 における波動関数の値について)

計算の出発点 x_1 は、波動関数が $\phi \approx 0$ となりそうな点を選んで適当に決めるが、

$x = x_1$ における ϕ の値として

$$\phi_{x=x_1} = 1$$

と固定して数値解を求めた。(式A1.1)からわかるように、(式A1.1)を満足する解 ϕ の定数倍もまた解であり、 ϕ の初期値は任意で良い。 ϕ の解を一旦求めたうえで、規格化の条件(式A1.2)を満足する様に ϕ を決め直す。

(式A1.6)と式A1.7の収束性について)

収束によって V を決定する場合、 V_1 はオーダが分かっている程度で値の変動が大きい、 V_2 については(式A1.3)で決められる値の前後わずかな変動範囲内にあるので、 V_1 の大きな変動が V_2 の収束性にあまり影響が出ない様にしないと V

の収束解が得られない。そこで(式A1.9)における行列式では特に、

$$\frac{\partial F_2}{\partial V_1} = 0$$

とにおいて収束性を改良している。

(注) エネルギー固有値 E を計算上不定とする理由について。

式A1.3で示されるエネルギー固有値は実測値より決められた値であるが、この値を前ページの計算の過程で定数として用いると、解は収束しない。何故なら、

① ポテンシャル $U(x)$ の形状自体に誤差がある

② 数値解法上に誤差がある

ために、(式A1.3)で示される E は厳密に波動方程式(A1.1)の固有値にはなっていないからである。計算上、境界条件を満足する様に E をわずかに修正することによって ϕ の解が得られるようになる。このわずかな修正値は、後の計算の例では $E = 2184.06 \text{ cm}^{-1}$ に対して、 $\Delta E \approx 2 \text{ cm}^{-1}$ であり、0.1%程度と小さいが、この程度の固有値誤差でも収束性には大きく影響する。

3. 計算の妥当性評価

3.1 波動関数の形状の妥当性評価

計算手法の妥当性を検証するために、 ϕ の解がわかっている文献例^[H28]と比較する。

計算条件として以下を設定した。

(1) 対象分子 ヨウ素 I_2

原子質量 $m = 2.1072986 \times 10^{-24} \text{ kg}$

$$\text{reduced mass } \mu = \frac{m}{2}$$

(2) 対象軌道 $X^1\Sigma_g^+$ (基底軌道)

ポテンシャル曲線のデータを表A1.1及び表A1.2に示す。

表A1.1 振動量子数 v に

対するエネルギー

v	Observed* $G(v)$ cm^{-1}
0	107.08
1	320.39
2	532.44
3	743.24
4	952.90
5	1161.40
6	1368.60
7	1574.40
8	1778.95
9	1982.13
10	2184.06
11	2384.74
12	2584.04
13	2782.09
14	2978.82
15	3174.18
16	3368.24
17	3560.97
18	3752.28
19	3942.24
20	4130.71
21	4317.78
22	4503.49
23	4687.70
24	4870.44
25	5051.78
26	5231.63
27	5409.91
28	5586.69
29	5761.92

表A1.2 振動量子数 v に対するポテンシャル曲線

の位置

TABLE Results of calculations for the potential energy curve* for the ground state of I_2 ($J=0$ rotational state).

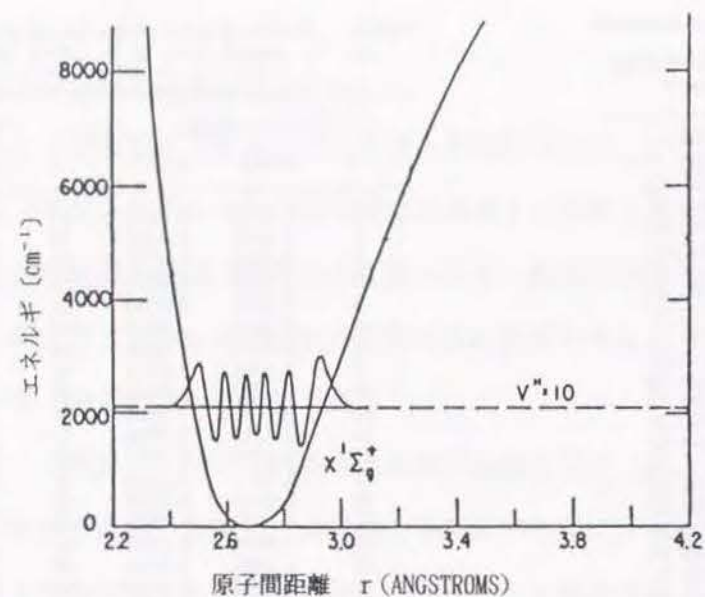
Turning points			Turning points		
v	$r_-(\text{\AA})$	$r_+(\text{\AA})$	v	$r_-(\text{\AA})$	$r_+(\text{\AA})$
0	2.6178	2.7175	33	2.3587	3.2575
1	2.5850	2.7580	35	2.3521	3.2846
2	2.5634	2.7873	37	2.3459	3.3120
3	2.5464	2.8120	39	2.3400	3.3399
4	2.5321	2.8340	41	2.3343	3.3686
5	2.5197	2.8542	43	2.3290	3.3978
6	2.5086	2.8731	45	2.3240	3.4277
7	2.4984	2.8911	47	2.3193	3.4586
9	2.4805	2.9248	49	2.3149	3.4905
11	2.4650	2.9564	51	2.3108	3.5236
13	2.4511	2.9864	53	2.3069	3.5583
15	2.4386	3.0154	55	2.3033	3.5946
17	2.4271	3.0434	57	2.3000	3.6328
19	2.4165	3.0709	59	2.2970	3.6730
21	2.4067	3.0980	61	2.2942	3.7155
23	2.3974	3.1247	63	2.2919	3.7606
25	2.3888	3.1512	65	2.2899	3.8088
27	2.3806	3.1777	67	2.2882	3.8605
29	2.3729	3.2042	68	2.2875	3.8877
31	2.3656	3.2307	69	2.2869	3.9160

(3) 計算対象振動量子数 $v = 10$

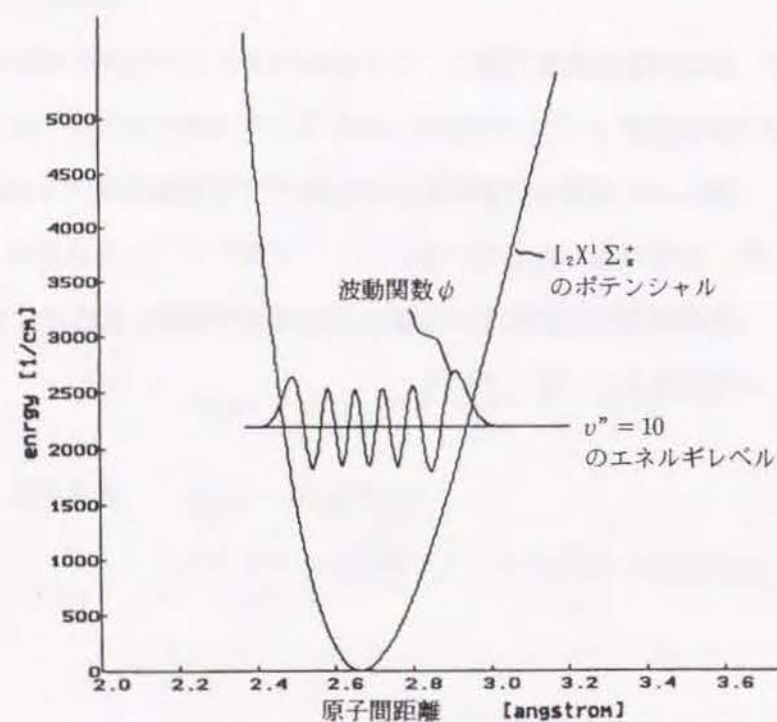
(4) 計算結果

図A1.4に本報の計算結果(b)と文献^[H28]に記載されている値(a)を比較して示す。両者は良く合っている。

波動関数の振幅に対する値は、図A1.4では特に意味はなく、波の山の数や大小関係は良く一致している。



(a) 文献^[H28]の波動関数



(b) 本報の計算結果

図A1.4 本報の計算による波動関数と文献^[H28]との比較
(ヨウ素分子 I_2 の $X^1\Sigma_g^+$ 軌道における $v''=10$ 振動準位)

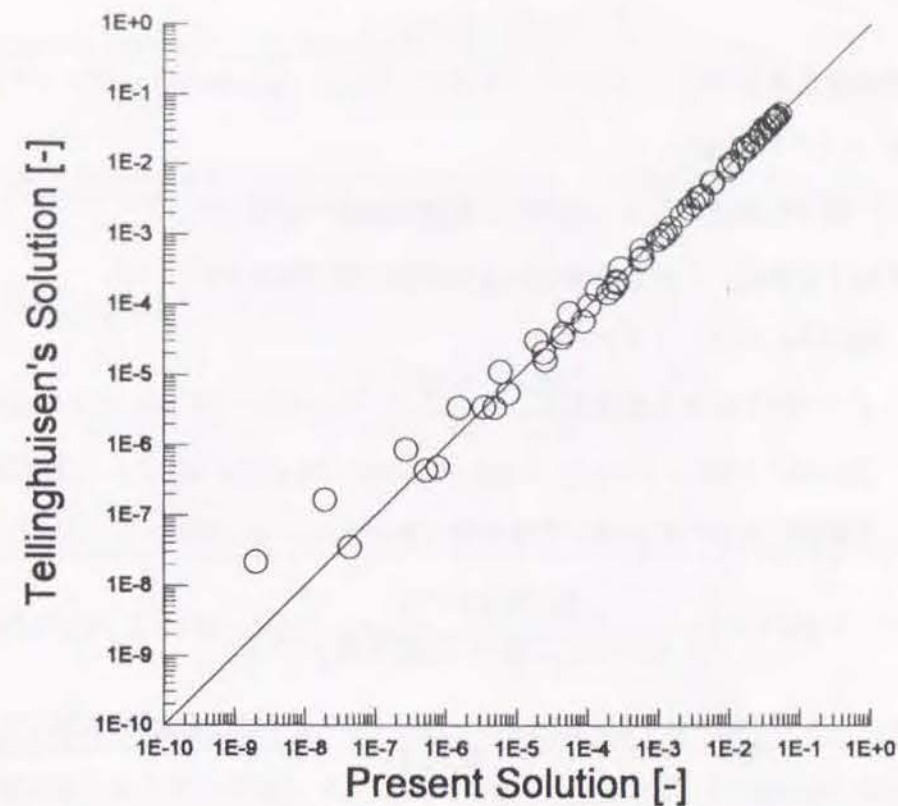


Fig.A1.5(a) Calculation Results of the Franck-Condon Factors

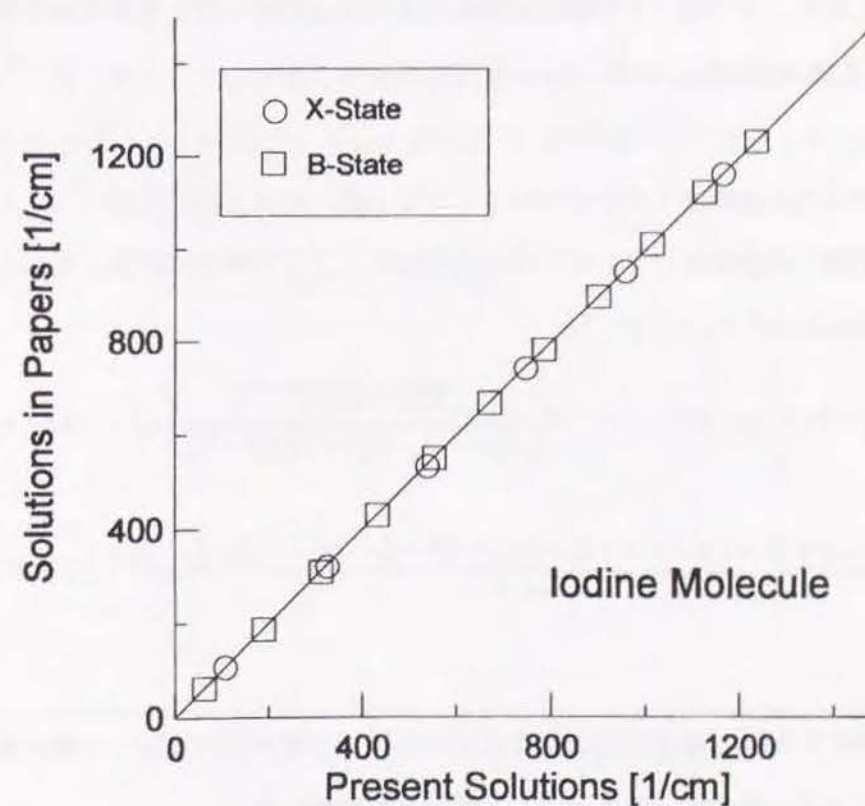


Fig. A1.5(b) Calculation Results of Eigen Values

1. 角運動量と電子スピンとのカップリング (Russel-Saundersカップリング)

(1) $L' = L - 1$ の場合

L' は下位準位, L は上位準位の角運動量量子数を示す。

J' は下位準位, J は上位準位の全角運動量量子数を示す。

(a) $S(\gamma SLJ, \gamma' SL - 1 J + 1)$

$J' = J + 1$ のときを考える。

$$S(\gamma SLJ, \gamma' SL - 1 J + 1) = 2(J+1) |(\alpha j \parallel P \parallel \alpha' j')|^2 \Xi(j, j') \quad (\text{文献[M7], 式7}^4(5))$$

文献[M7]式11³(8)を使って書き替えると

$$\begin{aligned} &= (2J+1) \left(-\frac{\sqrt{Q(J)Q(J+1)}}{2(J+1)\sqrt{(2J+1)(2J+3)}} \right)^2 |(\gamma L \parallel P \parallel \gamma' L - 1)|^2 (J+1)(2J+3) \\ &= \frac{(-1)^2 (J+S-L+1)(L+S-J)(J+S-L+2)(L+S-J-1)}{4(J+1)} |(\gamma L \parallel P \parallel \gamma' L - 1)|^2 \end{aligned}$$

これは文献[M7] 2⁹(2a) に一致する。

その他についても同様に求まる ($J' = J - 1$, $J' = J$ の場合は文献[M7]P238に記載されており, $J' = J - 1$ の場合の式を次頁2節の規則に従って書き換えRブランチの式(第4章(4.9))として用いる。)

(2) $L' = L + 1$ の場合

文献[M7]に記載されていないケースなので, ここで新たに計算しておく。

(a) $S(\gamma SLJ, \gamma' SL + 1 J + 1)$

$$\begin{aligned} &= (2J+1) |(\gamma L \parallel P \parallel \gamma' L + 1)|^2 \left(\frac{\sqrt{P(J+2)P(J+1)}}{2(J+1)\sqrt{(2J+1)(2J+3)}} \right)^2 (J+1)(2J+3) \\ &= \frac{(J-S+L+2)(J+S+L+3)(J-S+L+1)(J+S+L+2)}{4(J+1)} |(\gamma L \parallel P \parallel \gamma' L + 1)|^2 \end{aligned}$$

$\Delta F = \Delta J$ の遷移規則より本式を次ページ2節の規則に従って書き換えPブランチの式(第4章(4.8式))として用いる。

(b) $S(\gamma SLJ, \gamma' SL + 1 J)$

$$\begin{aligned} &= (2J+1) |(\gamma L \parallel P \parallel \gamma' L + 1)|^2 \left(\frac{\sqrt{P(J+1)Q(J-1)}}{2J(J+1)} \right)^2 J(J+1) \\ &= \frac{(2J+1)(J-S+L+1)(J+S+L+2)(S+L-J+1)(J+S-L)}{4J(J+1)} |(\gamma L \parallel P \parallel \gamma' L + 1)|^2 \end{aligned}$$

(c) $S(\gamma SLJ, \gamma' SL + 1 J - 1)$

$$\begin{aligned} &= (2J+1) |(\gamma L \parallel P \parallel \gamma' L + 1)|^2 \left(\frac{\sqrt{Q(J-1)Q(J-2)}}{2J\sqrt{(2J-1)(2J+1)}} \right)^2 J(2J-1) \\ &= \frac{(S+L-J+1)(J+S-L)(S+L-J+2)(J+S-L-1)}{4J} |(\gamma L \parallel P \parallel \gamma' L + 1)|^2 \end{aligned}$$

2. 核スピンを含む強度表現式

全角運動量と核スピンのカップリングについても, 上記1, 2のRussel-Saundersカップリングの仮定が成立するものと仮定する^[16]。

$S \rightarrow I$ (核スピン量子数)

$L \rightarrow J$ (電子スピンを考慮した全角運動量子数)

$J \rightarrow F$ (核スピンを考慮した全角運動量子数) と読みかえる。

このとき $|(\gamma L \parallel P \parallel \gamma' L')|^2 = |(\gamma J \parallel P \parallel \gamma' J')|^2$ となるから, $|(\gamma L \parallel P \parallel \gamma' L')|^2$ はヘーネル・ロンドン因子の意となり, 同一ブランチ内では定数とみなせる。

O₂ シューマン・ルンゲ・バンドのシミュレーションコード

```

PROGRAM MAIN
*****
* PROGRAMM BY ETSURO HIRAI (08-11-91)
*
* Simulation of Schumann-Runge Bands
*****

CHARACTER*40 AUSDAT, GRAFIK, RQP, FCFFILE, BDFILE, PROCFILE
INTEGER VX, VA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX

COMMON/CPHY/CLIGHT, HPLANC, BOLTZ
COMMON/CPHY/VX, VA, KX, KA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX, KMIN, KMAX
COMMON/CNORM/POPDENS, PMAX, KPMIN, KPMAX, GNVX(0:30)
COMMON/CINTPQR/FLINTR, FLINTQ, FLINTP, FLINT
COMMON/CROTIVB/EROT(0:30, 0:100, 3), EVIB(0:30), PART, PARTVX, PPLIM
COMMON/CWAVE/WAVENH, WAVECH
COMMON/CTXA/TX(0:30, 0:100, 3), TA(0:30, 0:100, 3)
COMMON/CGXA/GX(0:30), GA(0:30)
COMMON/CFXA/FX(0:30, 0:100, 3), FA(0:30, 0:100, 3)
COMMON/CABDV/BVX(0:30), DVX(0:30), BVA(0:30), DVA(0:30), TEA, TEX
COMMON/CFAC/CFAC(0:23, 0:20)
COMMON/COEXYZE/OEX, OEXEX, OEXYX, OEA, OEXEA, OXEYA
COMMON/CQUANT/JX(0:30, 0:100, 3), JA(0:30, 0:100, 3)
COMMON/CCONST/IC, LW, WLMIN, WLMAX, TVIB, TROT, ITA, ITB, NORM, PLIM
COMMON/CEQIND/IGVEQ, IGREQ, IAVEQ, IAREQ

CHAPTER 1-----
CALL OZINPUT
CALL OPENF
CHAPTER 2-----
CALL GRANDSTATE
CALL GRANDPFUNC
CHAPTER 3-----
CALL UPPERSTATE
CALL OUTP1
CHAPTER 4-----TRANSITION
CALL TRANSIT
CHAPTER 5-----OUTPUT
CALL OUTP3

STOP
END

*****
SUBROUTINE OPENF
*****
CHARACTER*40 AUSDAT, GRAFIK, RQP, FCFFILE, BDFILE, PROCFILE
COMMON/CPHY/CLIGHT, HPLANC, BOLTZ
COMMON/CPHY/VX, VA, KX, KA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX, KMIN, KMAX
COMMON/CNORM/POPDENS, PMAX, KPMIN, KPMAX, GNVX(0:30)
COMMON/CROTIVB/EROT(0:30, 0:100, 3), EVIB(0:30), PART, PARTVX, PPLIM
COMMON/CTXA/TX(0:30, 0:100, 3), TA(0:30, 0:100, 3)
COMMON/CGXA/GX(0:30), GA(0:30)
COMMON/CFXA/FX(0:30, 0:100, 3), FA(0:30, 0:100, 3)
COMMON/CABDV/BVX(0:30), DVX(0:30), BVA(0:30), DVA(0:30), TEA, TEX
COMMON/CFAC/CFAC(0:23, 0:20)
COMMON/COEXYZE/OEX, OEXEX, OEXYX, OEA, OEXEA, OXEYA
COMMON/CQUANT/JX(0:30, 0:100, 3), JA(0:30, 0:100, 3)
COMMON/CCONST/IC, LW, WLMIN, WLMAX, TVIB, TROT, ITA, ITB, NORM, PLIM
COMMON/CEQIND/IGVEQ, IGREQ, IAVEQ, IAREQ

C-----
OPEN(1, FILE=AUSDAT)
WRITE(1, *) 'AUSGABEDATEI:', AUSDAT

OPEN(2, FILE=GRAFIK)

C-----FRANC CONDON FACTOR DATA
OPEN(3, FILE=FCFFILE)
DO 10, J=0, 23
DO 10, J=1, 5
JJ=(J-1)*5
J2=4
IF(J.EQ.5) J2=0
READ(3, 1000) (QFCF(I, J1), J1=JJ, JJ+J2)
1000 FORMAT(5(1P12.3))
C-----ROTATIONAL BAND CONST.DATA
OPEN(4, FILE=BDFILE)
DO 20, I=0, 30
READ(4, 2000) BVX(I), DVX(I), BVA(I), DVA(I)
DO 21, I=0, 20
READ(4, 2100) CB(I), CD(I), CR(I), CG(I), CRD(I), CGD(I)
2000 FORMAT(2(F10.5, E12.5))
2100 FORMAT(F10.5, E12.5, 2F10.5, 2E12.5)
C-----DATA PROCESSING FILE
OPEN(5, FILE=PROCFILE)

RETURN
END

*****
SUBROUTINE GRANDSTATE
*****
INTEGER VX, VA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX

COMMON/CPHY/CLIGHT, HPLANC, BOLTZ
COMMON/CPHY/VX, VA, KX, KA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX, KMIN, KMAX
COMMON/CNORM/POPDENS, PMAX, KPMIN, KPMAX, GNVX(0:30)
COMMON/CROTIVB/EROT(0:30, 0:100, 3), EVIB(0:30), PART, PARTVX, PPLIM
COMMON/CTXA/TX(0:30, 0:100, 3), TA(0:30, 0:100, 3)
COMMON/CGXA/GX(0:30), GA(0:30)
COMMON/CFXA/FX(0:30, 0:100, 3), FA(0:30, 0:100, 3)
COMMON/CABDV/BVX(0:30), DVX(0:30), BVA(0:30), DVA(0:30), TEA, TEX
COMMON/COEXYZE/OEX, OEXEX, OEXYX, OEA, OEXEA, OXEYA
COMMON/CQUANT/JX(0:30, 0:100, 3), JA(0:30, 0:100, 3)
COMMON/CCONST/IC, LW, WLMIN, WLMAX, TVIB, TROT, ITA, ITB, NORM, PLIM
COMMON/CEQIND/IGVEQ, IGREQ, IAVEQ, IAREQ

C-----
* BERECHNUNG DER TERMENERGIEN
* T(V, K) : GESAMTENERGIE IN CM-1
* G(V) : VIBRATIONSTERMWERTE
* GX0 : NULLPUNKTENERGIE V''=0, OMEGA=1/2
* FX : ROTATIONSTERMWERTE

```

```

* FO : NULLPUNKTENERGIE HYPOTHETISCHES J=0 NIVEAU
* B, D : ROTATIONSKONSTANTEN

C-----
C TERMWERTE FÜR DEN X-ZUSTAND (GÜLTIGKEITSBEREICH V'' < 30)
C-----

GX0=GXVALUE(0, IGVEQ)
FX0=0.

DO 10, VX=0, VXMAX

GX(VX)=GXVALUE(VX, IGVEQ)-GX0

DO 10, KX=0, KMAX
DO 10, I=1, 3

NNX=KX+2-1

IF (IGREQ.EQ.1) THEN
FX(VX, KX, I)=ROT1( BVX(VX), DVX(VX), KX )
ELSEIF(IGREQ.EQ.2) THEN
FX(VX, KX, I)=ROT2( I, BVX(VX), KX )
ELSEIF(IGREQ.EQ.3) THEN
FX(VX, KX, I)=ROT4( VX, NNX, I )
ENDIF

TX(VX, KX, I)= GX(VX) + FX(VX, KX, I)

JX(VX, KX, I)=NNX

10 CONTINUE

RETURN
END

*****
SUBROUTINE GRANDPFUNC
*****
INTEGER VX, VA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX

COMMON/CPHY/CLIGHT, HPLANC, BOLTZ
COMMON/CPHY/VX, VA, KX, KA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX, KMIN, KMAX
COMMON/CNORM/POPDENS, PMAX, KPMIN, KPMAX, GNVX(0:30)
COMMON/CROTIVB/EROT(0:30, 0:100, 3), EVIB(0:30), PART, PARTVX, PPLIM
COMMON/CTXA/TX(0:30, 0:100, 3), TA(0:30, 0:100, 3)
COMMON/CGXA/GX(0:30), GA(0:30)
COMMON/CFXA/FX(0:30, 0:100, 3), FA(0:30, 0:100, 3)
COMMON/CQUANT/JX(0:30, 0:100, 3), JA(0:30, 0:100, 3)
COMMON/CCONST/IC, LW, WLMIN, WLMAX, TVIB, TROT, ITA, ITB, NORM, PLIM

C-----
*ROTATIONS-/VIBRATIONSENERGIEN DES ELEKTRONISCHEN GRUNDZUSTANDES
C-----

PART=0.0
PARTVX=0.0

DO 30, VX=0, VXMAX

EVIB(VX) =HPLANC*CLIGHT* GX(VX) *100
partvx=partvx+exp(-EVIB(VX)/BOLTZ/TVIB)
DO 30, KX=0, KMAX
DO 30, I=1, 3
if(kx.eq.0.and.i.ne.1) then
goto 30
else
EROT(VX, KX, I)=HPLANC*CLIGHT* FX(VX, KX, I) *100
endif
PART=PART+(2*JX(VX, KX, I)+1)*EXP(-EVIB(VX)/BOLTZ /TVIB)
2 *EXP(-EROT(VX, KX, I) /BOLTZ /TROT)

30 CONTINUE

C-----
C MAX/MIN BESETZUNG DER ROTATIONS-ZUSTÄNDE
C-----

PPLIM=PART/100*PLIM
PMAX=0.0
KPMIN=-1
KPMAX=0

DO 50, KX=0, KMAX

POPDENS = EXP(-EVIB(0) /BOLTZ /TVIB)
1 *EXP(-EROT(0, KX, 2) /BOLTZ /TROT)
2 * (2*JX(0, KX, 2)+1)

IF(PMAX.LT.POPDENS) THEN
PMAX=POPDENS
KPMAX=KX
ENDIF

IF(KPMIN.LT.0.AND.POPDENS.GT.PPLIM) KPMIN=KX

50 CONTINUE

```



```

C-----GRANDSTATE POPULATION
do 20, vx=0, vxmax
  GNXX(VX)=EXP(-EVIB(VX)/BOLTZ(TVIB))/partvx*100.
  continue
RETURN
END
*****
SUBROUTINE UPPERSTATE
*****
INTEGER VX, VA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX

COMMON/CVXVAK/VX, VA, KX, KA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX, KMIN, KMAX
COMMON/CTXA/TX(0:30, 0:100, 3), TA(0:30, 0:100, 3)
COMMON/CGXA/GX(0:30, 0:100, 3), GA(0:30, 0:100, 3)
COMMON/CFXA/FX(0:30, 0:100, 3), FA(0:30, 0:100, 3)
COMMON/CABDV/BVX(0:30, 0:100, 3), BVA(0:30, 0:100, 3), DVA(0:30, 0:100, 3), TEA, TEX
COMMON/COEXYZE/OEX, OEXEX, OEXEY, OEA, OEXEA, OXEYEA
COMMON/CQUANT/JX(0:30, 0:100, 3), JA(0:30, 0:100, 3)
COMMON/CEQIND/IGVEQ, IGREQ, IAVEQ, IAREQ
COMMON/CCBDR/CB(0:30, 0:100, 3), CD(0:30, 0:100, 3), CR(0:30, 0:100, 3), CG(0:30, 0:100, 3)
*, CRD(0:30, 0:100, 3), CGD(0:30, 0:100, 3)

C-----
C TERMWERTE FUER DEN B-ZUSTAND(3 SIGMA[-])
C-----
GA0=0.
FA0=0.

DO 14, VA=0, VAMAX
  GA(VA)=GAVALUE(VA, IAVEQ)

DO 14, KA=0, KMAX
DO 14, I=1, 3
  NNA=KA+2-I

  IF (IAREQ.EQ.1) THEN
    FA(VA, KA, I)=ROT1( BVA(VA), DVA(VA), KA )
  ELSEIF (IAREQ.EQ.2) THEN
    IF(VA.LT.17) THEN
      FA(VA, KA, I)=ROT3(I, NNA, CB(VA), CD(VA), CR(VA), CG(VA), CRD(VA), CGD(VA))
    ELSE
      FA(VA, KA, I)=ROT3(I, NNA, CB(17), CD(17), CR(17), CG(17), CRD(17), CGD(17))
    ENDIF
  ENDIF
  ENDIF

  TA(VA, KA, I)= GA(VA) + FA(VA, KA, I)
  JA(VA, KA, I)=NNA

14 CONTINUE

RETURN
END
*****
SUBROUTINE OUTP1
*****
INTEGER VX, VA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX

COMMON/CVXVAK/VX, VA, KX, KA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX, KMIN, KMAX
COMMON/CTXA/TX(0:30, 0:100, 3), TA(0:30, 0:100, 3)
COMMON/CGXA/GX(0:30, 0:100, 3), GA(0:30, 0:100, 3)
COMMON/CFXA/FX(0:30, 0:100, 3), FA(0:30, 0:100, 3)
COMMON/CQUANT/JX(0:30, 0:100, 3), JA(0:30, 0:100, 3)
COMMON/CCONST/IC, LW, WLMIN, WLMAX, TVIB, TROT, ITA, ITB, NORM, PLIM

C-----
C AUSGABE DER TERMENERGIEN
C-----
IF(ITA.EQ.0) RETURN

C-----GRANDSTATE OUTPUT
C-----
iprint=6
if(mod(kmax+1, iprint).eq.0) then
  jj=(kmax+1)/iprint
else
  jj=(kmax+1)/iprint+1
endif

do 11, vx=0, vxmax
  write(1,3000) ' VX=', VX, 'GX(BAND ORIGIN):', GX(VX), '[1/cm]'
do 12, j=1, jj
  j1=(j-1)*iprint
  j2=j *iprint-1
  if(j.eq.jj) j2=kmax
  write(1,3020) ' K ', ( k, k=j1, j2)
  write(1,3021) ' FX F1(+1)', (fx(vx, k, 1), k=j1, j2)
  write(1,3021) ' F2( 0)', (fx(vx, k, 2), k=j1, j2)
  write(1,3021) ' F3(-1)', (fx(vx, k, 3), k=j1, j2)
  write(1,3021) ' TX F1(+1)', (tx(vx, k, 1), k=j1, j2)
  write(1,3021) ' F2( 0)', (tx(vx, k, 2), k=j1, j2)
  write(1,3021) ' F3(-1)', (tx(vx, k, 3), k=j1, j2)
12 continue
11 continue

C-----UPPERSTATE OUTPUT
C-----
do 15, va=0, vamax

```

```

  write(1,3000) ' VA=', VA, 'GA(BAND ORIGIN):', GA(VA), '[1/cm]'
do 16, j=1, jj
  j1=(j-1)*iprint
  j2=j *iprint-1
  if(j.eq.jj) j2=kmax
  write(1,3020) ' K ', ( k, k=j1, j2)
  write(1,3021) ' FA F1(+1)', (fa(va, k, 1), k=j1, j2)
  write(1,3021) ' F2( 0)', (fa(va, k, 2), k=j1, j2)
  write(1,3021) ' F3(-1)', (fa(va, k, 3), k=j1, j2)
  write(1,3021) ' TA F1(+1)', (ta(va, k, 1), k=j1, j2)
  write(1,3021) ' F2( 0)', (ta(va, k, 2), k=j1, j2)
  write(1,3021) ' F3(-1)', (ta(va, k, 3), k=j1, j2)
16 continue
15 continue

C-----FORMAT
3000 format(A4, I3, 5X, A16, F10.3, A6)
3020 format(a9, 6(4x, I3, 3x))
3021 format(a9, 6f10.3)
RETURN
END

*****
SUBROUTINE TRANSITION
*****
CHARACTER*40 AUSDAT, GRAFIK, RQP, FCFFILE, BDFILE, PROCFILE
INTEGER VX, VA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX

COMMON/CCHARC/AUSDAT, GRAFIK, RQP, FCFFILE, BDFILE, PROCFILE
COMMON/CPHY/CLIGHT, HPLANC, BOLTZ
COMMON/CVXVAK/VX, VA, KX, KA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX, KMIN, KMAX
COMMON/CNORM/POPDENS, PMAX, KPMIN, KPMAX, GNXX(0:30)
COMMON/CINTPQR/FLINTR, FLINTQ, FLINTP, FLINT
COMMON/CROTIVB/EROT(0:30, 0:100, 3), EVIB(0:30), PART, PARTVX, PPLIM
COMMON/CWAVE/WAVENM, WAVECH
COMMON/CTXA/TX(0:30, 0:100, 3), TA(0:30, 0:100, 3)
COMMON/CGXA/GX(0:30, 0:100, 3), GA(0:30, 0:100, 3)
COMMON/CFXA/FX(0:30, 0:100, 3), FA(0:30, 0:100, 3)
COMMON/CFACT/QFCF(0:23, 0:20)
COMMON/CQUANT/JX(0:30, 0:100, 3), JA(0:30, 0:100, 3)
COMMON/CCONST/IC, LW, WLMIN, WLMAX, TVIB, TROT, ITA, ITB, NORM, PLIM
COMMON/CHL/HLRQ21, HLRP31, HLPQ12, HLRQ32, HLPQ23, HLRP13, HLTR31, HLRP13

C-----
* BERECHNUNG DER RELATIVEN INTENSITAETEN DER ANREGUNGSUEBERGAENGE
* QFCF:FRANCK-CONDON-FAKTOREN
* HL:HOENL-LONDON FAKTOREN
C-----
if(itb.eq.0) return
IC=0

2 FORMAT(' O2 Schumann-Runge Band ' /
1 ' ---Quantum Number--- ---Wave Length--- ' /
2 ' (VX KX JX) (VA KA JA) W(nm) W(1/cm) Intensity Name')

WRITE(1,2)

DO 44, VX=VXMIN, VXMAX
  WRITE(*,9999) ' NOW CALCULATING VX=', VX
9999 FORMAT(A25, I3)

DO 44, VA=VAMIN, VAMAX
  WRITE(*,9999) ' VA= ', VA
  write(1,*) ' '
DO 43, KX=KMIN, KMAX
  IF(mod(KX,2).eq.0) GOTO 43

  IF(ITB.NE.3) THEN
    KA1=KX-1
    KA2=KX+1
  ELSE
    KA1=KX-3
    KA2=KX+3
  END IF

  IF(KA1.LT.0) KA1=0
  DO 42, KA=KA1, KA2

  IF(mod(KA,2).EQ.1) GOTO 42
  write(*,*) KX, KA, KA1, KA2
  DO 41, I1=1, 3

  C-----SPECTRA INTENSITY
  POPDENS = EXP(-EVIB(VX) /BOLTZ /TVIB)
  * EXP(-EROT(VX, KX, I1)/BOLTZ /TROT)
  * (2* JX(VX, KX, I1) +1)
  /PART

  CALL HLFAC(11, JX(VX, KX, I1), HLR, HLQ, HLP)

  DO 41, I2=1, 3

  C-----RECHNUNG DER UEBERGANGSWELLENLAENGEN DER RO-VI NIVEAUS IN NM
  WAVECH= TA(VA, KA, I2)-TX(VX, KX, I1)
  IF(WAVECH.GT.0.0) WAVENM= (1 /WAVECH )*10**7

  C-----LINE SELECTION
  CALL TRUE(11, I2, INDTR)
  IF(INDTR.EQ.0) GOTO 41

  C-----
  WRITE(*,*) POPDENS, QFCF(VX, VA), HLR, HLQ, HLP

  FLINT =POPDENS*(TA(VA, KA, I2)-TX(VX, KX, I1))
  *QFCF(VX, VA)

```



```

* / (2*JX(VX,KX,11)+1)
IF(NORM.EQ.1) FLINT=FLINT*
2 EXP(-(2*(TA(VA,KA,12)-TX(VX,KX,11)-51722)/123.))**2*LOG(2))
IF ((JA(VA,KA,12)-JX(VX,KX,11)).EQ.1) GOTO 51
IF ((JA(VA,KA,12)-JX(VX,KX,11)).EQ.0) GOTO 52
IF ((JA(VA,KA,12)-JX(VX,KX,11)).EQ.(-1)) GOTO 53
C-----R-Branch
51 IF (I1.EQ.1.AND.(KA-KX).EQ.1) THEN
    FLINT=FLINT*HLR
    RQP=' R1-----'
ELSE IF (I1.EQ.2.AND.(KA-KX).EQ.1) THEN
    FLINT=FLINT*HLR
    RQP=' R2-----'
ELSE IF (I1.EQ.3.AND.(KA-KX).EQ.1) THEN
    FLINT=FLINT*HLR
    RQP=' R3-----'
ELSE IF (I1.EQ.1.AND.(KA-KX).EQ.3) THEN
    FLINT=FLINT*HLR31
    RQP=' R31-----'
    IF(ITB.NE.3) GOTO 41
ELSE IF (I1.EQ.3.AND.(KA-KX).EQ.(-1)) THEN
    FLINT=FLINT*HLR13
    RQP=' R13-----'
    IF(ITB.NE.3) GOTO 41
END IF
GOTO 54
C-----Q-Branch
52 IF (ITB.NE.3) GOTO 41
IF (I1.EQ.3.AND.(KA-KX).EQ.(-1)) THEN
    FLINT=FLINT*HLRQ23
    RQP=' ---pQ23--'
ELSE IF (I1.EQ.2.AND.(KA-KX).EQ.(-1)) THEN
    FLINT=FLINT*HLRQ12
    RQP=' ---pQ12--'
ELSE IF (I1.EQ.1.AND.(KA-KX).EQ.1) THEN
    FLINT=FLINT*HLRQ21
    RQP=' ---rQ21--'
ELSE IF (I1.EQ.2.AND.(KA-KX).EQ.1) THEN
    FLINT=FLINT*HLRQ32
    RQP=' ---rQ32--'
END IF
GOTO 54
C-----P-Branch
53 IF (IT.EQ.1.AND.(KA-KX).EQ.(-1)) THEN
    FLINT=FLINT*HLP
    RQP=' -----P1'
ELSE IF (I1.EQ.2.AND.(KA-KX).EQ.(-1)) THEN
    FLINT=FLINT*HLP
    RQP=' -----P2'
ELSE IF (I1.EQ.3.AND.(KA-KX).EQ.(-1)) THEN
    FLINT=FLINT*HLP
    RQP=' -----P3'
ELSE IF (I1.EQ.3.AND.(KA-KX).EQ.(-3)) THEN
    FLINT=FLINT*HLNP13
    RQP=' -----pP13'
    IF(ITB.NE.3) GOTO 41
ELSE IF (I1.EQ.1.AND.(KA-KX).EQ.1) THEN
    FLINT=FLINT*HLRP31
    RQP=' -----rP31'
    IF(ITB.NE.3) GOTO 41
END IF
C-----PRINT OUT
54 CALL OUTP2(I1,I2,FLINT)
41 CONTINUE
42 CONTINUE
43 CONTINUE
44 CONTINUE
RETURN
END
*****
SUBROUTINE TRUE(I1,I2,INDTR)
*****
CHARACTER*40 AUSDAT, GRAFIK, RQP, FCFFILE, BDFILE, PROCFILE
INTEGER VX, VA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX
COMMON/CCHARC/AUSDAT, GRAFIK, RQP, FCFFILE, BDFILE, PROCFILE
COMMON/CDVXVAK/VX, VA, KX, KA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX, KMIN, KMAX
COMMON/CWAVE/WAVENM, WAVECH
COMMON/COUANT/JX(0:30,0:100,3), JA(0:30,0:100,3)
COMMON/CCONST/IC, LW, WLMIN, WLMAX, TVIB, TROT, ITA, ITB, NORM, PLIM
C-----
* WELLENLAENGENSELEKTION, AUSWAHLREGELN, BILDSCHIRM-/DRUCKERAUSGABE

```

```

C-----
INDTR=0
IF ( WAVENM.LT.WLMIN.OR.WAVENM.GT.WLMAX ) RETURN
IF ( ITB.EQ.0 ) RETURN
C---- triplet structure are not printed out.
IF ( ITB.EQ.1.AND.I1.GE.2 ) RETURN
C----- SELECTION RULES OF Electronic Transitions
Condition 1---- quantum no.k
IF ( ABS(KX-KA).GT.3 ) RETURN
Condition 2---- quantum no.j
IF ( ABS(JX(VX,KX,11)-JA(VA,KA,12)).GT.1 ) RETURN
Condition 3---- (+) doesn't couple with (-)
IF ( KX.EQ.KA ) RETURN
Condition 4---- even no. branches is missing
IF ( KX.EQ.(2*(KX/2)) ) RETURN
Condition 5---- the lowest rotational term is singl.
IF ( KX.EQ.0.AND.JX(VX,KX,11).LE.0 ) RETURN
IF ( KA.EQ.0.AND.JA(VA,KA,12).LE.0 ) RETURN
Condition 6---- satellite branch is weak
IF ( I1.NE.I2.AND.ITB.LT.3 ) RETURN
INDTR=1
RETURN
END
*****
SUBROUTINE OUTP2(I1,I2,FLINT)
*****
CHARACTER*40 AUSDAT, GRAFIK, RQP, FCFFILE, BDFILE, PROCFILE
INTEGER VX, VA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX
COMMON/CCHARC/AUSDAT, GRAFIK, RQP, FCFFILE, BDFILE, PROCFILE
COMMON/CDVXVAK/VX, VA, KX, KA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX, KMIN, KMAX
COMMON/CWAVE/WAVENM, WAVECH
COMMON/COUANT/JX(0:30,0:100,3), JA(0:30,0:100,3)
COMMON/CCONST/IC, LW, WLMIN, WLMAX, TVIB, TROT, ITA, ITB, NORM, PLIM
C-----
IC=IC+1
WRITE(1,1000) ' (', VX, KX, JX(VX,KX,11), ')',
' (', VA, KA, JA(VA,KA,12), ')',
WAVENM, WAVECH, FLINT, RQP, ' (', KX, ')',
2
3
WRITE(5,1010) IC, VX, KX, JX(VX,KX,11),
VA, KA, JA(VA,KA,12), WAVECH, FLINT
C-----FORMAT
1000 FORMAT(A2,3I3,A1,1X,A1,3I3,A1,F9.4,F10.3)
1010 FORMAT(I6,6I4,F11.4,1PE12.4)
RETURN
END
*****
SUBROUTINE HLFAC(I,N,HLR,HLQ,HLP)
*****
COMMON/CHL/HLRQ21,HLRP31,HLPQ12,HLRQ32,HLPQ23,HLRP13,HLTR31,HLNP13
C-----
Eq. by J.B.Tatum
C Canadian Journal of Physics, vol.44, p2944, (1966)
C-----
IF(I.EQ.1) THEN
    HLR = FLOAT(N*(2*N+3)) / FLOAT(2*N+1)
    HLP = FLOAT((N-1)*(2*N+1)) / FLOAT(2*N-1)
    HLRQ21 = 1/FLOAT(N)
    HLRP31 = 1/FLOAT(N)/FLOAT(2*N-1)/FLOAT(2*N+1)
ELSEIF(I.EQ.2) THEN
    HLR = FLOAT(N*(N+2)) / FLOAT(N+1)
    HLP = FLOAT((N-1)*(N+1)) / FLOAT(N)
    HLPQ12 = 1/FLOAT(N)
    HLRQ32 = 1/FLOAT(N+1)
ELSE
    HLR = FLOAT((N+2)*(2*N+1)) / FLOAT(2*N+3)
    HLP = FLOAT((N+1)*(2*N-1)) / FLOAT(2*N+1)
    HLPQ23 = 1/FLOAT(N+1)
    HLRP13 = 1/FLOAT(N+1)/FLOAT(2*N+1)/FLOAT(2*N+3)
END IF
HLTR31 = 0.0
HLNP13 = 0.0
HLQ = 0.0
RETURN
END
*****
SUBROUTINE OUTP3
*****
CHARACTER*40 AUSDAT, GRAFIK, RQP, FCFFILE, BDFILE, PROCFILE
INTEGER VX, VA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX
COMMON/CCHARC/AUSDAT, GRAFIK, RQP, FCFFILE, BDFILE, PROCFILE
COMMON/CPHY/CLIGHT, HPLANC, BOLTZ
COMMON/CDVXVAK/VX, VA, KX, KA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX, KMIN, KMAX
COMMON/CNORM/POPDENS, PMAX, KPMIN, KPMAX, GNVX(0:30)
COMMON/CINTPQR/FLINTR, FLINTQ, FLINTP, FLINT
COMMON/CROTIVB/EROT(0:30,0:100,3), EVIB(0:30), PART, PARTVX, PPLIM
COMMON/CWAVE/WAVENM, WAVECH
COMMON/CCONST/IC, LW, WLMIN, WLMAX, TVIB, TROT, ITA, ITB, NORM, PLIM
COMMON/CEQIND/IGVEQ, IGREQ, IAVEQ, IAREQ
C-----
write (1,*)

```



```

*1 v 'SCHWINGUNGSBESETZUNG[%]'
DO 10, I=0, VXMAX
WRITE(1, '(14,F10.2)') 1, GNVX(I)

WRITE(1, '(A,F7.1)') PARTITION FUNCTION( Zvib*Zrot ) : ',PART
WRITE(1, '(A,F7.1)') PARTITION FUNCTION( Zvib ) : ',PARTVX
PARTJ=PART/PARTVX
WRITE(1, '(A,F7.1)') PARTITION FUNCTION( Zrot ) : ',PARTJ

IF (KPMIN.EQ.0) THEN
WRITE(1, '(A)') BESETZUNGSGRENZE NICHT ERREICHT !
GOTO 91
END IF
WRITE(1, '(A,13 ,F7.3,A)') MIN. ROTATIONSBESETZUNG: J=',KPMIN,
PPLIM,'%
91 WRITE(1, '(A,13 ,F5.1,A)') MAX. ROTATIONSBESETZUNG: J=',KPMAX,
GNMAX/PART*100,'%

C-----Wave Length Region
WRITE(1, '(A,F7.2,A)') MIN. WELLENLAENGE (NM): ',WLMIN, 'NM'
WRITE(1, '(A,F7.2,A)') MAX. WELLENLAENGE (NM): ',WLMAX, 'NM'

C-----Quantum Number
WRITE(1, '(A,F7.0,A)') VIBRATIONSTEMPERATUR=',TVIB, 'K'
WRITE(1, '(A,F7.0,A)') ROTATIONSTEMPERATUR=',TROT, 'K'
WRITE(1, '(A,13,A,13)') VXMIN=',VXMIN, ' VXMAX=',VXMAX
WRITE(1, '(A,13,A,13)') VAMIN=',VAMIN, ' VAMAX=',VAMAX
WRITE(1, '(A,14,A,14)') KMIN=',KMIN, ' KMAX=',KMAX
WRITE(1, ') '

C-----Total Number of Spectra
WRITE(2,1001) IC
WRITE(2,1002) WLMIN,WLMAX,TVIB,TROT

C-----Term Value Formulae
WRITE(1,1000) ' IGVEQ =',IGVEQ
IF(IGVEQ.EQ.1) WRITE(1,*) ' Data by D.M.Creek is used. '
IF(IGVEQ.EQ.2) WRITE(1,*) ' Eq. by Herzberg is used. '
WRITE(1,1000) ' IGREQ =',IGREQ
IF(IGREQ.EQ.1) WRITE(1,*) ' Eq. by Herzberg is used. '
IF(IGREQ.EQ.2) WRITE(1,*) ' Eq. by Schlapp is used. '
WRITE(1,1000) ' IAVEQ =',IAVEQ
IF(IAVEQ.EQ.1) WRITE(1,*) ' Data by D.M.Creek is used. '
IF(IAVEQ.EQ.2) WRITE(1,*) ' Eq. by Herzberg is used. '
IF(IAVEQ.EQ.3) WRITE(1,*) ' Eq. by Cheung is used. '
WRITE(1,1000) ' IAREQ =',IAREQ
IF(IAREQ.EQ.1) WRITE(1,*) ' Eq. by Herzberg is used. '
IF(IAREQ.EQ.2) WRITE(1,*) ' Eq. by Cheung is used. '
1000 FORMAT(A10,I1)
1001 FORMAT(I7)
1002 FORMAT(4F10.3)
RETURN
END

```

```

*****
FUNCTION GXVALUE(I,IEQ)
*****
IF(IEQ.EQ.1) GOTO 100
IF(IEQ.EQ.2) GOTO 200
C-----
C Data of D.M.Creek et al
C Proc.R.Soc.Lond.A.341,pp517-536(1975)
C-----
100 IF(I.EQ.0) GXVALUE= 787.2
IF(I.EQ.1) GXVALUE= 787.2 + 1556.385
IF(I.EQ.2) GXVALUE= 787.2 + 3089.11
IF(I.EQ.3) GXVALUE= 787.2 + 4598.61
IF(I.EQ.4) GXVALUE= 787.2 + 6084.69
IF(I.EQ.5) GXVALUE= 787.2 + 7547.69
IF(I.EQ.6) GXVALUE= 787.2 + 8988.14
IF(I.EQ.7) GXVALUE= 787.2 + 10406.88
IF(I.EQ.8) GXVALUE= 787.2 + 11801.67
IF(I.EQ.9) GXVALUE= 787.2 + 13173.60
IF(I.EQ.10) GXVALUE= 787.2 + 14523.24
IF(I.EQ.11) GXVALUE= 787.2 + 15852.42
IF(I.EQ.12) GXVALUE= 787.2 + 17156.56
IF(I.EQ.13) GXVALUE= 787.2 + 18437.04
IF(I.EQ.14) GXVALUE= 787.2 + 19695.20
IF(I.EQ.15) GXVALUE= 787.2 + 20930.90
IF(I.EQ.16) GXVALUE= 787.2 + 22143.10
IF(I.EQ.17) GXVALUE= 787.2 + 23331.50
IF(I.EQ.18) GXVALUE= 787.2 + 24497.11
IF(I.EQ.19) GXVALUE= 787.2 + 25638.53
IF(I.EQ.20) GXVALUE= 787.2 + 26755.46
IF(I.EQ.21) GXVALUE= 787.2 + 27847.50
IF(I.EQ.22) GXVALUE= 787.2 + 28914.05
IF(I.EQ.23) GXVALUE= 787.2 + 29954.28
IF(I.EQ.24) GXVALUE= 787.2 + 30967.58
IF(I.EQ.25) GXVALUE= 787.2 + 31952.62
IF(I.EQ.26) GXVALUE= 787.2 + 32908.26
IF(I.EQ.27) GXVALUE= 787.2 + 33833.13
IF(I.EQ.28) GXVALUE= 787.2 + 34724.78
IF(I.GE.29) GXVALUE= 0.0

RETURN
C-----
C Equation of Herzberg
C Herzberg,Molecular Spectra & Molecular Structure
C p103,eq(111,104),p560,table 39
C-----
200 TEX=0.
OEX=1580.361
OEXEX=12.0730
OEYEX=0.0546
GXVALUE=TEX+OEX*(1+.5)-OEXEX*(1+.5)**2.+OEYEX*(1+.5)**3.

RETURN
END
*****
FUNCTION GAVALUE(I,IEQ)
*****
IF(IEQ.EQ.1) GOTO 100
IF(IEQ.EQ.2) GOTO 200
IF(IEQ.EQ.3) GOTO 300
C-----
C Data of D.M.Creek et al
C Proc.R.Soc.Lond.A.341,pp517-536(1975)
C-----
100 IF(I.EQ.0) GAVALUE= 49357.20
IF(I.EQ.1) GAVALUE= 50045.75
IF(I.EQ.2) GAVALUE= 50710.91
IF(I.EQ.3) GAVALUE= 51351.17
IF(I.EQ.4) GAVALUE= 51969.69
IF(I.EQ.5) GAVALUE= 52561.39
IF(I.EQ.6) GAVALUE= 53122.79
IF(I.EQ.7) GAVALUE= 53655.96
IF(I.EQ.8) GAVALUE= 54156.22
IF(I.EQ.9) GAVALUE= 54622.14
IF(I.EQ.10) GAVALUE= 55050.89
IF(I.EQ.11) GAVALUE= 55438.80
IF(I.EQ.12) GAVALUE= 55784.63
IF(I.EQ.13) GAVALUE= 56085.62
IF(I.EQ.14) GAVALUE= 56340.60
IF(I.EQ.15) GAVALUE= 56550.70
IF(I.EQ.16) GAVALUE= 56719.56
IF(I.EQ.17) GAVALUE= 56852.56
IF(I.EQ.18) GAVALUE= 56954.57
IF(I.EQ.19) GAVALUE= 57030.29
IF(I.EQ.20) GAVALUE= 57082.89
IF(I.EQ.21) GAVALUE= 57114.81
IF(I.GE.22) GAVALUE= 0.0

RETURN
C-----
C Equation of Herzberg
C Herzberg,Molecular Spectra & Molecular Structure
C p103,eq(111,104),p560,table 39
C-----
200 TEA = 49802.1 - 787.169075
OEA = 700.36
OEXEA = 8.002
OEYEA = -0.3753
GAVALUE=TEA+OEA*(1+.5)-OEXEA*(1+.5)**2.+OEYEA*(1+.5)**3.

```



```

      RETURN
C-----
C   Equation by Chung et al
C   J.Molecular.Spectroscopy,119,p1-10(1986)
C-----
300  T0 = 49004.75
      WE = 709.56
      WEYE= 10.92
      WEZE= -0.0176
      WEAE= -0.0180
      WEAE= 0.00029

      GAVALUE=T0+WE*(1+.5)-WEYE*(1+.5)**2.+WEZE*(1+.5)**3.
      *      +WEZE*(1+.5)**4.+WEAE*(1+.5)**5.
      RETURN
      END
*****
      FUNCTION ROT1(BV,DV,N)
*****
      ROT1=BV*N*(N+1)-DV*N*N*(N+1)*(N+1)

      RETURN
      END

*****
      FUNCTION ROT2(I,BV,N)
*****
C   Equation by Schlapp
C   Herzberg,Molecular Spectra & Molecular Structure
C   p223,eq(V,17)
C-----
      dimension nq(15),dc(15)
      DATA (Nq(j),j=1,15)/0,11,15,19,21,23,25,27,29,31,33,35,37,39,41/
      DATA (DC(j),j=1,15)/0,0.082,0.282,0.723,1.045,1.488,2.050,2.776,
      *3.657,4.750,6.103,7.745,9.597,11.841,14.414/

      RAMD=1.984
      GAMMA=-0.0084
      IF(I.EQ.1) ROT2=BV*N*(N+1)+(2*N+3)*BV-RAMD
      2   -SQRT((2*N+3)**2*BV**2+RAMD**2-2*RAMD*BV)+GAMMA*(N+1)
      IF(I.EQ.2) ROT2=BV*N*(N+1)
      IF(I.EQ.3) ROT2=BV*N*(N+1)-(2*N-1)*BV-RAMD
      2   +SQRT((2*N-1)**2*BV**2+RAMD**2-2*RAMD*BV)-GAMMA*N

C-----
C   compensation by Hirai
C-----
      if(N.eq.0) then
        rot2=0.0
        return
      endif

      do 11,j=2,15
        if(N.LE.Nq(j)) goto 20
      11  continue
      20  if(j.ne.15) then
          drot=(n-nq(j-1))/(nq(j)-nq(j-1))*(dc(j)-dc(j-1))+dc(j-1)
        else
          drot=(n-nq(14))/(nq(15)-nq(14))*(dc(15)-dc(14))+dc(14)
        endif
      11  rot2=rot2-drot

      RETURN
      END

*****
      FUNCTION ROT3(I,N,B,D,R,G,RD,GD)
*****
C   Equation by Cheung et al
C   J.Molecular.Spectroscopy,119,p1-10(1986)
C-----
      X=FLOAT( N*(N+1) )
      A11=B*(X+2)-D*(X**2+B*X+4)-4./3.*R-2*G-4./3.*RD*(X+2)-4*GD*(X+1)
      A12= -2*SQRT(X)*(B-2*D*(X+1)-G/2.-2./3.*RD-RD*(X+4.)/2.)
      A21= A12
      A22=B*X -D*(X**2+4*X) +2./3.*R -G+2./3.*RD*X -3*GD*X

      IF(I.EQ.1) ROT3=( A11+A22-SQRT((A11-A22)**2+4*A12*A21))/2
      IF(I.EQ.2) ROT3=B*X-D*X**2+2./3.*R-G+2./3.*X*RD-X*GD
      IF(I.EQ.3) ROT3=( A11+A22+SQRT((A11-A22)**2+4*A12*A21))/2

      RETURN
      END

*****
      FUNCTION ROT4(IV,N,I)
*****
C   Equation by L.Veseth et al
C   Molecular Physics ,vol.27,no.2,p511,1974
C-----
      X=FLOAT( N*(N+1) )

      IF(IV.EQ.0) THEN
        T1=3.979
        T0=0.0
        B1=1.437696
        B0=0.0
        D1=4.859E-6
        D0=D1
        HV=0.0

```

```

      P=2.03926
      D=4.92E-6
      ELSEIF(IV.GE.1) THEN
        T1=3.992
        T0=0.0
        B1=1.421918
        B0=0.0
        D1=4.892E-6
        D0=D1
        HV=0.0
        P=2.01700
        D=4.47E-6
      ENDIF

      A11=T0+B0*X-D0*X*(X+4)+HV*(X**2*(X+4)+8*X*(X+1))
      A12=-P*SQRT(2*X)+4*D*(X-1)*SQRT(X)-HV*(6*X**2-4*(X-2))*SQRT(X)
      A21= A12
      A22=T1+B1*(X-2)-D1*( (X-2)**2+4*X )
      *      +HV*((X-2)*( (X-2)**2+4*X )+8*X*(X-1))

      if(i.ne.2) rot4=( A11+A22-SQRT((A11-A22)**2+4*A12*A21))/2
      if(i.eq.2) rot4=( A11+A22+SQRT((A11-A22)**2+4*A12*A21))/2

      RETURN
      END

```


ArF*エキシマレーザ波長に含まれるO₂シューマン・ルンゲ・バンドのブランチ

```

*****
BLOCK DATA
*****
CHARACTER*40 AUSDAT, GRAFIK, RQP, FCFFILE, BDFILE, PROCFILE
INTEGER VX, VA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX
COMMON/CCHARC/AUSDAT, GRAFIK, RQP, FCFFILE, BDFILE, PROCFILE
COMMON/CONST/IC, LW, WLMIN, WLMAX, TVIB, TROT, ITA, ITB, NORM, PLIM
COMMON/CPHY/CLIGHT, HPLANC, BOLTZ
COMMON/CSVVAK/VX, VA, KX, KA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX, KMIN, KMAX
COMMON/CEQIND/IGVEQ, IGREQ, IAVEQ, IAREQ

DATA VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX, KMIN, KMAX
1 /0, 0, 13, 13, 0, 30 /

DATA CLIGHT, HPLANC, BOLTZ
1 /2.99792458E8, 6.6260755E-34, 1.380658E-23/

-----PRINT INDEX
C ITA=0 ; Term Values are not printed
C ITA=1 ; are printed
C ITB=0 ; Nothing are printed in File
C ITB=1 ; Singlet Lines are printed in File
C ITB=2 ; Triplet Lines are printed in File
C ITB=3 ; All the Lines are printed in File
DATA ITA, ITB/0, 3/

-----INDEX
C DATA WLMIN, WLMAX/175., 230.0/
DATA TVIB, TROT/1000., 100./
DATA PLIM, NORM/.01, 0/

-----DATA FILE
C DATA AUSDAT/ 'C:\SPECTRA\O2\SPECDATA\test_sat.DAT'/
DATA GRAFIK/ 'C:\O2 SRB.GRF'/
DATA PROCFILE/ 'C:\O2 SRB.WKF'/
DATA FCFFILE/ 'C:\SPECTRA\O2\CONST\O2FCF.DAT'/
DATA BDFILE / 'C:\SPECTRA\O2\CONST\BDCONST.DAT'/

-----TERM VALUE EQ. SELECTION
C DATA IGVEQ, IGREQ, IAVEQ, IAREQ/1, 2, 1, 2/

END

```

The Schumann-Runge Band

---Quantum Number---				---Wave Length---		Intensity	Name
(VX KX JX)	(VA KA JA)	W(nm)	W(1/cm)				
(0 11 10)	(4 8 9)	192.9186	51835.330	0.000E+00	----	nP13	[11]
(0 11 12)	(4 10 11)	192.8119	51864.010	1.674E-03	-----	P1	[11]
(0 11 11)	(4 10 11)	192.8196	51861.950	1.260E-05	----	p012	[11]
(0 11 11)	(4 10 10)	192.8122	51863.950	1.513E-03	-----	P2	[11]
(0 11 10)	(4 10 11)	192.8124	51863.880	2.634E-08	pr13	----	[11]
(0 11 10)	(4 10 10)	192.8050	51865.870	1.272E-05	----	p023	[11]
(0 11 10)	(4 10 9)	192.8105	51864.400	1.393E-03	-----	P3	[11]
(0 13 12)	(4 10 11)	193.0801	51791.960	0.000E+00	-----	nP13	[13]
(0 13 14)	(4 12 13)	192.9507	51826.710	1.384E-03	-----	P1	[13]
(0 13 13)	(4 12 13)	192.9585	51824.630	7.550E-06	----	p012	[13]
(0 13 13)	(4 12 12)	192.9509	51826.670	1.268E-03	-----	P2	[13]
(0 13 12)	(4 12 13)	192.9514	51826.530	1.129E-08	pr13	----	[13]
(0 13 12)	(4 12 12)	192.9438	51828.570	7.619E-06	----	p023	[13]
(0 13 12)	(4 12 11)	192.9491	51827.140	1.185E-03	-----	P3	[13]
(0 13 13)	(4 14 13)	192.8049	51865.910	7.016E-06	----	r032	[13]
(0 15 14)	(4 12 13)	193.2617	51743.320	0.000E+00	-----	nP13	[15]
(0 15 16)	(4 14 15)	193.1094	51784.110	1.061E-03	-----	P1	[15]
(0 15 15)	(4 14 15)	193.1172	51782.010	4.387E-06	----	p012	[15]
(0 15 15)	(4 14 14)	193.1095	51784.100	9.827E-04	-----	P2	[15]
(0 15 14)	(4 14 15)	193.1102	51783.890	4.924E-09	pr13	----	[15]
(0 15 14)	(4 14 14)	193.1025	51785.980	4.427E-06	----	p023	[15]
(0 15 14)	(4 14 13)	193.1076	51784.600	9.273E-04	-----	P3	[15]
(0 15 16)	(4 16 17)	192.9359	51830.690	1.129E-03	R1	-----	[15]
(0 15 16)	(4 16 16)	192.9279	51832.820	4.158E-06	----	r021	[15]
(0 15 16)	(4 16 15)	192.9329	51831.500	4.065E-09	----	rP31	[15]
(0 15 15)	(4 16 16)	192.9358	51830.720	1.050E-03	R2	-----	[15]
(0 15 15)	(4 16 15)	192.9407	51829.390	4.116E-06	----	r032	[15]
(0 15 14)	(4 16 15)	192.9337	51831.270	9.948E-04	R3	-----	[15]
(0 17 16)	(4 14 15)	193.4648	51688.980	0.000E+00	-----	nP13	[17]
(0 17 18)	(4 16 17)	193.2897	51735.820	7.572E-04	-----	P1	[17]
(0 17 17)	(4 16 17)	193.2976	51733.700	2.453E-06	----	p012	[17]
(0 17 17)	(4 16 16)	193.2896	51735.840	7.066E-04	-----	P2	[17]
(0 17 16)	(4 16 17)	193.2906	51735.560	2.143E-09	pr13	----	[17]
(0 17 16)	(4 16 16)	193.2827	51737.700	2.475E-06	----	p023	[17]
(0 17 16)	(4 16 15)	193.2876	51736.370	6.720E-04	-----	P3	[17]
(0 17 18)	(4 18 19)	193.0934	51788.400	8.002E-04	R1	-----	[17]
(0 17 18)	(4 18 18)	193.0853	51790.580	2.343E-06	----	r021	[17]
(0 17 18)	(4 18 17)	193.0901	51789.300	1.809E-09	----	rP31	[17]
(0 17 17)	(4 18 18)	193.0932	51788.460	7.492E-04	R2	-----	[17]
(0 17 17)	(4 18 17)	193.0980	51787.180	2.319E-06	----	r032	[17]
(0 17 16)	(4 18 17)	193.0910	51789.040	7.149E-04	R3	-----	[17]
(0 17 18)	(4 20 19)	192.8716	51847.980	0.000E+00	tr31	-----	[17]
(0 19 18)	(4 16 17)	193.6874	51629.590	0.000E+00	-----	nP13	[19]
(0 19 20)	(4 18 19)	193.4892	51682.470	5.058E-04	-----	P1	[19]
(0 19 19)	(4 18 19)	193.4972	51680.340	1.319E-06	----	p012	[19]
(0 19 19)	(4 18 18)	193.4890	51682.520	4.749E-04	-----	P2	[19]
(0 19 18)	(4 18 19)	193.4903	51682.180	9.224E-10	pr13	-----	[19]
(0 19 18)	(4 18 18)	193.4821	51684.360	1.331E-06	----	p023	[19]
(0 19 18)	(4 18 17)	193.4869	51683.070	4.545E-04	-----	P3	[19]
(0 19 20)	(4 20 21)	193.2701	51741.050	5.318E-04	R1	-----	[19]
(0 19 20)	(4 20 20)	193.2618	51743.280	1.268E-06	----	r021	[19]
(0 19 20)	(4 20 19)	193.2664	51742.050	7.928E-10	----	rP31	[19]
(0 19 19)	(4 20 20)	193.2698	51741.140	5.006E-04	R2	-----	[19]
(0 19 19)	(4 20 19)	193.2744	51739.910	1.255E-06	----	r032	[19]
(0 19 18)	(4 20 19)	193.2675	51741.750	4.804E-04	R3	-----	[19]
(0 19 20)	(4 22 21)	193.0252	51806.710	0.000E+00	tr31	-----	[19]
(0 21 22)	(4 20 21)	193.7103	51623.500	3.164E-04	-----	P1	[21]
(0 21 21)	(4 20 21)	193.7183	51621.340	6.784E-07	----	p012	[21]
(0 21 21)	(4 20 20)	193.7099	51623.570	2.985E-04	-----	P2	[21]
(0 21 20)	(4 20 21)	193.7115	51623.160	3.882E-10	pr13	-----	[21]
(0 21 20)	(4 20 20)	193.7031	51625.390	6.844E-07	----	p023	[21]
(0 21 20)	(4 20 19)	193.7077	51624.160	2.871E-04	-----	P3	[21]
(0 21 22)	(4 22 23)	193.4682	51688.070	3.312E-04	R1	-----	[21]
(0 21 22)	(4 22 22)	193.4597	51690.350	6.552E-07	----	r021	[21]
(0 21 22)	(4 22 21)	193.4642	51689.160	3.386E-10	----	rP31	[21]
(0 21 21)	(4 22 22)	193.4678	51688.200	3.132E-04	R2	-----	[21]
(0 21 21)	(4 22 21)	193.4722	51687.010	6.484E-07	----	r032	[21]
(0 21 20)	(4 22 21)	193.4654	51688.830	3.019E-04	R3	-----	[21]
(0 21 22)	(4 24 23)	193.2001	51759.820	0.000E+00	tr31	-----	[21]
(0 23 24)	(4 24 25)	193.6870	51629.700	1.938E-04	R1	-----	[23]
(0 23 24)	(4 24 24)	193.6783	51632.020	3.232E-07	----	r021	[23]
(0 23 24)	(4 24 23)	193.6825	51630.890	1.404E-10	----	rP31	[23]
(0 23 23)	(4 24 24)	193.6864	51629.850	1.839E-04	R2	-----	[23]
(0 23 23)	(4 24 23)	193.6907	51628.710	3.199E-07	----	r032	[23]
(0 23 22)	(4 24 23)	193.6839	51630.520	1.779E-04	R3	-----	[23]
(0 23 24)	(4 26 25)	193.3955	51707.520	0.000E+00	tr31	-----	[23]
(0 25 26)	(4 28 27)	193.6115	51649.820	0.000E+00	tr31	-----	[25]
(0 27 28)	(4 30 29)	193.8483	51586.740	0.000E+00	tr31	-----	[27]
(1 17 16)	(7 14 15)	193.0036	51812.510	0.000E+00	-----	nP13	[17]
(1 17 18)	(7 16 17)	192.8420	51855.930	7.942E-05	-----	P1	[17]
(1 17 17)	(7 16 17)	192.8498	51853.820	2.573E-07	----	p012	[17]
(1 17 17)	(7 16 16)	192.8417	51856.010	7.411E-05	-----	P2	[17]
(1 17 16)	(7 16 17)	192.8429	51855.680	2.248E-10	pr13	-----	[17]
(1 17 16)	(7 16 16)	192.8348	51857.870	2.596E-07	----	p023	[17]

(1 17 16) (7 16 15) 192.8402 51856.400 7.048E-05 -----P3[17]
(1 19 18) (7 16 17) 193.2335 51750.870 0.000E+00 -----nP13[19]
(1 19 20) (7 18 19) 193.0508 51799.830 5.335E-05 -----P1[19]
(1 19 19) (7 18 19) 193.0588 51797.690 1.391E-07 ----p12--[19]
(1 19 19) (7 18 18) 193.0505 51799.920 5.009E-05 -----P2[19]
(1 19 18) (7 18 19) 193.0519 51799.530 9.728E-11 pR13-----[19]
(1 19 18) (7 18 18) 193.0436 51801.760 1.404E-07 ----p23--[19]
(1 19 18) (7 18 17) 193.0489 51800.340 4.794E-05 -----P3[19]
(1 19 20) (7 20 21) 192.8493 51853.950 5.608E-05 R1-----[19]
(1 19 20) (7 20 20) 192.8409 51856.230 1.337E-07 ----rQ21--[19]
(1 19 20) (7 20 19) 192.8460 51854.840 8.361E-11 ----rP31[19]
(1 19 19) (7 20 20) 192.8488 51854.090 5.280E-05 R2-----[19]
(1 19 19) (7 20 19) 192.8540 51852.700 1.323E-07 ----rQ32--[19]
(1 19 18) (7 20 19) 192.8471 51854.540 5.066E-05 R3-----[19]
(1 21 20) (7 18 19) 193.4863 51683.230 0.000E+00 ----nP13[21]
(1 21 22) (7 20 21) 193.2827 51737.700 3.357E-05 -----P1[21]
(1 21 21) (7 20 21) 193.2907 51735.540 7.199E-08 ----p12--[21]
(1 21 21) (7 20 20) 193.2822 51737.810 3.168E-05 -----P2[21]
(1 21 20) (7 20 21) 193.2839 51737.360 4.119E-11 pR13-----[21]
(1 21 20) (7 20 20) 193.2754 51739.630 7.262E-08 ----p23--[21]
(1 21 20) (7 20 19) 193.2806 51738.250 3.046E-05 -----P3[21]
(1 21 22) (7 22 23) 193.0604 51797.260 3.514E-05 R1-----[21]
(1 21 22) (7 22 22) 193.0518 51799.570 6.952E-08 ----rQ21--[21]
(1 21 22) (7 22 21) 193.0568 51798.230 3.592E-11 ----rP31[21]
(1 21 21) (7 22 22) 193.0598 51797.410 3.323E-05 R2-----[21]
(1 21 21) (7 22 21) 193.0648 51796.070 6.880E-08 ----rQ32--[21]
(1 21 20) (7 22 21) 193.0581 51797.890 3.203E-05 R3-----[21]
(1 21 22) (7 24 23) 192.8147 51863.270 0.000E+00 tR31-----[21]
(1 23 22) (7 20 21) 193.7616 51609.810 0.000E+00 ----nP13[23]
(1 23 24) (7 22 23) 193.5369 51669.740 1.984E-05 -----P1[23]
(1 23 23) (7 22 23) 193.5450 51667.570 3.561E-08 ----p12--[23]
(1 23 23) (7 22 22) 193.5364 51669.880 1.880E-05 -----P2[23]
(1 23 22) (7 22 23) 193.5383 51669.370 1.698E-11 pR13-----[23]
(1 23 22) (7 22 22) 193.5296 51671.680 3.592E-08 ----p23--[23]
(1 23 22) (7 22 21) 193.5346 51670.340 1.816E-05 -----P3[23]
(1 23 24) (7 24 25) 193.2939 51734.700 2.070E-05 R1-----[23]
(1 23 24) (7 24 24) 193.2851 51737.050 3.453E-08 ----rQ21--[23]
(1 23 24) (7 24 23) 193.2899 51735.750 1.499E-11 ----rP31[23]
(1 23 23) (7 24 24) 193.2932 51734.880 1.965E-05 R2-----[23]
(1 23 23) (7 24 23) 193.2981 51733.570 3.417E-08 ----rQ32--[23]
(1 23 22) (7 24 23) 193.2913 51735.380 1.901E-05 R3-----[23]
(1 23 24) (7 26 25) 193.0273 51806.150 0.000E+00 tR31-----[23]
(1 25 26) (7 24 25) 193.8138 51595.930 1.104E-05 -----P1[25]
(1 25 25) (7 24 25) 193.8220 51593.730 1.681E-08 ----p12--[25]
(1 25 25) (7 24 24) 193.8131 51596.090 1.049E-05 -----P2[25]
(1 25 24) (7 24 25) 193.8153 51595.520 6.786E-12 pR13-----[25]
(1 25 24) (7 24 24) 193.8064 51597.880 1.696E-08 ----p23--[25]
(1 25 24) (7 24 23) 193.8113 51596.570 1.017E-05 -----P3[25]
(1 25 26) (7 26 27) 193.5500 51666.250 1.148E-05 R1-----[25]
(1 25 26) (7 26 26) 193.5410 51668.640 1.636E-08 ----rQ21--[25]
(1 25 26) (7 26 25) 193.5457 51667.380 6.053E-12 ----rP31[25]
(1 25 25) (7 26 26) 193.5492 51666.450 1.093E-05 R2-----[25]
(1 25 25) (7 26 25) 193.5539 51665.190 1.619E-08 ----rQ32--[25]
(1 25 24) (7 26 25) 193.5472 51666.970 1.061E-05 R3-----[25]
(1 25 26) (7 28 27) 193.2625 51743.100 0.000E+00 tR31-----[25]
(1 27 28) (7 28 29) 193.8289 51591.890 5.996E-06 R1-----[27]
(1 27 28) (7 28 28) 193.8197 51594.340 7.389E-09 ----rQ21--[27]
(1 27 28) (7 28 27) 193.8243 51593.110 2.357E-12 ----rP31[27]
(1 27 27) (7 28 28) 193.8280 51592.130 5.725E-06 R2-----[27]
(1 27 27) (7 28 27) 193.8326 51590.910 7.311E-09 ----rQ32--[27]
(1 27 26) (7 28 27) 193.8260 51592.670 5.570E-06 R3-----[27]
(1 27 28) (7 30 29) 193.5205 51674.110 0.000E+00 tR31-----[27]
(2 9 8) (10 6 7) 192.8179 51862.410 0.000E+00 ----nP13[9]
(2 11 10) (10 8 9) 192.9679 51822.090 0.000E+00 ----nP13[11]
(2 11 12) (10 10 11) 192.8793 51845.900 1.856E-06 -----P1[11]
(2 11 11) (10 10 11) 192.8870 51843.840 1.397E-08 ----p12--[11]
(2 11 11) (10 10 10) 192.8773 51846.450 1.677E-06 -----P2[11]
(2 11 10) (10 10 11) 192.8798 51845.760 2.920E-11 pR13-----[11]
(2 11 10) (10 10 10) 192.8701 51848.370 1.410E-08 ----p23--[11]
(2 11 10) (10 10 9) 192.8761 51846.740 1.544E-06 -----P3[11]
(2 13 12) (10 10 11) 193.1418 51775.420 0.000E+00 ----nP13[13]
(2 13 14) (10 12 13) 193.0345 51804.220 1.546E-06 -----P1[13]
(2 13 13) (10 12 13) 193.0422 51802.140 8.432E-09 ----p12--[13]
(2 13 13) (10 12 12) 193.0322 51804.820 1.417E-06 -----P2[13]
(2 13 12) (10 12 13) 193.0352 51804.040 1.261E-11 pR13-----[13]
(2 13 12) (10 12 12) 193.0252 51806.710 8.510E-09 ----p23--[13]
(2 13 12) (10 12 11) 193.0309 51805.160 1.323E-06 -----P3[13]
(2 13 14) (10 14 15) 192.9095 51837.770 1.658E-06 R1-----[13]
(2 13 14) (10 14 14) 192.8993 51840.520 7.915E-09 ----rQ21--[13]
(2 13 14) (10 14 13) 192.9048 51839.050 1.011E-11 ----rP31[13]
(2 13 13) (10 14 14) 192.9070 51838.450 1.528E-06 R2-----[13]
(2 13 13) (10 14 13) 192.9125 51836.970 7.835E-09 ----rQ32--[13]
(2 13 12) (10 14 13) 192.9055 51838.860 1.435E-06 R3-----[13]
(2 15 14) (10 12 13) 193.3389 51722.650 0.000E+00 ----nP13[15]
(2 15 16) (10 14 15) 193.2127 51756.420 1.196E-06 -----P1[15]
(2 15 15) (10 14 15) 193.2206 51754.320 4.942E-09 ----p12--[15]
(2 15 15) (10 14 14) 193.2103 51757.080 1.107E-06 -----P2[15]
(2 15 14) (10 14 15) 193.2136 51756.200 5.548E-12 pR13-----[15]
(2 15 14) (10 14 14) 193.2033 51758.960 4.988E-09 ----p23--[15]
(2 15 14) (10 14 13) 193.2088 51757.480 1.045E-06 -----P3[15]
(2 15 16) (10 16 17) 193.0693 51794.880 1.272E-06 R1-----[15]
(2 15 16) (10 16 16) 193.0587 51797.710 4.684E-09 ----rQ21--[15]
(2 15 16) (10 16 15) 193.0639 51796.310 4.579E-12 ----rP31[15]
(2 15 15) (10 16 16) 193.0665 51795.610 1.182E-06 R2-----[15]
(2 15 15) (10 16 15) 193.0718 51794.210 4.637E-09 ----rQ32--[15]
(2 15 14) (10 16 15) 193.0648 51796.090 1.121E-06 R3-----[15]
(2 15 16) (10 18 17) 192.9020 51839.800 0.000E+00 tR31-----[15]
(2 17 16) (10 14 15) 193.5608 51663.360 0.000E+00 ----nP13[17]
(2 17 18) (10 16 17) 193.4158 51702.080 8.615E-07 -----P1[17]

(2 17 17) (10 16 17) 193.4237 51699.960 2.791E-09 ----p12--[17]
(2 17 17) (10 16 16) 193.4131 51702.800 8.039E-07 -----P2[17]
(2 17 16) (10 16 17) 193.4168 51701.820 2.438E-12 pR13-----[17]
(2 17 16) (10 16 16) 193.4062 51704.660 2.817E-09 ----p23--[17]
(2 17 16) (10 16 15) 193.4114 51703.250 7.646E-07 -----P3[17]
(2 17 18) (10 18 19) 193.2538 51745.420 9.103E-07 R1-----[17]
(2 17 18) (10 18 18) 193.2430 51748.330 2.666E-09 ----rQ21--[17]
(2 17 18) (10 18 17) 193.2479 51747.010 2.058E-12 ----rP31[17]
(2 17 17) (10 18 18) 193.2509 51746.210 8.523E-07 R2-----[17]
(2 17 17) (10 18 17) 193.2558 51744.890 2.638E-09 ----rQ32--[17]
(2 17 16) (10 18 17) 193.2489 51746.750 8.133E-07 R3-----[17]
(2 17 18) (10 20 19) 193.0675 51795.350 0.000E+00 tR31-----[17]
(2 19 18) (10 16 17) 193.8053 51598.180 0.000E+00 ----nP13[19]
(2 19 20) (10 18 19) 193.6416 51641.810 5.819E-07 -----P1[19]
(2 19 19) (10 18 19) 193.6496 51639.670 1.518E-09 ----p12--[19]
(2 19 19) (10 18 18) 193.6386 51642.590 5.464E-07 -----P2[19]
(2 19 18) (10 18 19) 193.6427 51641.510 1.061E-12 pR13-----[19]
(2 19 18) (10 18 18) 193.6317 51644.430 1.531E-09 ----p23--[19]
(2 19 18) (10 18 17) 193.6367 51643.100 5.229E-07 -----P3[19]
(2 19 20) (10 20 21) 193.4610 51690.000 6.116E-07 R1-----[19]
(2 19 20) (10 20 20) 193.4498 51692.990 1.458E-09 ----rQ21--[19]
(2 19 20) (10 20 19) 193.4545 51691.740 9.119E-13 ----rP31[19]
(2 19 19) (10 20 20) 193.4578 51690.850 5.758E-07 R2-----[19]
(2 19 19) (10 20 19) 193.4625 51689.610 1.443E-09 ----rQ32--[19]
(2 19 18) (10 20 19) 193.4556 51691.450 5.525E-07 R3-----[19]
(2 19 20) (10 22 21) 193.2558 51744.890 0.000E+00 tR31-----[19]
(2 21 22) (10 20 21) 193.8923 51575.020 3.684E-07 -----P1[21]
(2 21 21) (10 20 20) 193.8892 51575.860 3.476E-07 -----P2[21]
(2 21 20) (10 20 21) 193.8936 51574.690 4.520E-13 pR13-----[21]
(2 21 20) (10 20 20) 193.8823 51577.680 7.970E-10 ----p23--[21]
(2 21 20) (10 20 19) 193.8870 51576.430 3.343E-07 -----P3[21]
(2 21 22) (10 22 23) 193.6933 51628.010 3.856E-07 R1-----[21]
(2 21 22) (10 22 22) 193.6818 51631.080 7.628E-10 ----rQ21--[21]
(2 21 22) (10 22 21) 193.6861 51629.920 3.942E-13 ----rP31[21]
(2 21 21) (10 22 22) 193.6899 51628.930 3.646E-07 R2-----[21]
(2 21 21) (10 22 21) 193.6942 51627.760 7.549E-10 ----rQ32--[21]
(2 21 20) (10 22 21) 193.6874 51629.590 3.514E-07 R3-----[21]
(2 21 22) (10 24 23) 193.4691 51687.840 0.000E+00 tR31-----[21]
(2 23 24) (10 26 25) 193.7069 51624.380 0.000E+00 tR31-----[23]
(2 23 22) (11 20 21) 192.9620 51823.670 0.000E+00 ----nP13[23]
(2 25 24) (11 22 23) 193.2860 51736.800 0.000E+00 ----nP13[25]
(2 25 26) (11 24 25) 193.0795 51792.140 1.407E-07 -----P1[25]
(2 25 25) (11 24 25) 193.0877 51789.950 2.143E-10 ----p12--[25]
(2 25 25) (11 24 24) 193.0759 51793.110 1.337E-07 -----P2[25]
(2 25 24) (11 24 25) 193.0810 51791.730 8.649E-14 pR13-----[25]
(2 25 24) (11 24 24) 193.0692 51794.890 2.161E-10 ----p23--[25]
(2 25 24) (11 24 23) 193.0738 51793.670 1.296E-07 -----P3[25]
(2 25 26) (11 26 27) 192.8582 51851.570 1.462E-07 R1-----[25]
(2 25 26) (11 26 26) 192.8462 51854.800 2.085E-10 ----rQ21--[25]
(2 25 26) (11 26 25) 192.8504 51853.650 7.713E-14 ----rP31[25]
(2 25 25) (11 26 26) 192.8543 51852.610 1.392E-07 R2-----[25]
(2 25 25) (11 26 25) 192.8586 51851.460 2.063E-10 ----rQ32--[25]
(2 25 24) (11 26 25) 192.8519 51853.250 1.351E-07 R3-----[25]
(2 27 26) (11 24 25) 193.6357 51643.380 0.000E+00 ----nP13[27]
(2 27 28) (11 26 27) 193.4115 51703.250 7.425E-08 -----P1[27]
(2 27 27) (11 26 27) 193.4197 51701.040 9.724E-11 ----p12--[27]
(2 27 27) (11 26 26) 193.4076 51704.270 7.079E-08 -----P2[27]
(2 27 26) (11 26 27) 193.4131 51702.800 3.364E-14 pR13-----[27]
(2 27 26) (11 26 26) 193.4010 51706.040 9.808E-11 ----p23--[27]
(2 27 26) (11 26 25) 193.4053 51704.890 6.880E-08 -----P3[27]
(2 27 28) (11 28 29) 193.1728 51767.130 7.700E-08 R1-----[27]
(2 27 28) (11 28 28) 193.1605 51770.430 9.489E-11 ----rQ21--[27]
(2 27 28) (11 28 27) 193.1645 51769.350 3.027E-14 ----rP31[27]
(2 27 27) (11 28 28) 193.1687 51768.220 7.351E-08 R2-----[27]
(2 27 27) (11 28 27) 193.1727 51767.140 9.389E-11 ----rQ32--[27]
(2 27 26) (11 28 27) 193.1661 51768.910 7.154E-08 R3-----[27]
(2 27 28) (11 30 29) 192.9095 51837.770 0.000E+00 tR31-----[27]
(2 29 30) (11 28 29) 193.7695 51607.710 3.697E-08 -----P1[29]
(2 29 29) (11 28 29) 193.7779 51605.480 4.207E-11 ----p12--[29]
(2 29 29) (11 28 28) 193.7655 51608.780 3.534E-08 -----P2[29]
(2 29 28) (11 28 29) 193.7713 51607.230 1.261E-14 pR13-----[29]
(2 29 28) (11 28 28) 193.7589 51610.530 4.242E-11 ----p23--[29]
(2 29 28) (11 28 27) 193.7629 51609.460 3.443E-08 -----P3[29]
(2 29 30) (11 30 31) 193.5135 51675.980 3.825E-08 R1-----[29]
(2 29 30) (11 30 30) 193.5009 51679.360 4.116E-11 ----rQ21--[29]
(2 29 30) (11 30 29) 193.5046 51678.360 1.144E-14 ----rP31[29]
(2 29 29) (11 30 30) 193.5092 51677.130 3.661E-08 R2-----[29]
(2 29 29) (11 30 29) 193.5130 51676.130 4.072E-11 ----rQ32--[29]
(2 29 28) (11 30 29) 193.5064 51677.880 3.570E-08 R3-----[29]
(3 1 2) (14 0 1) 193.2776 51739.050 8.843E-10 -----P1[1]
(3 1 1) (14 0 1) 193.2847 51737.160 5.258E-10 ----p12--[1]
(3 1 0) (14 0 1) 193.2743 51739.930 1.776E-10 pR13-----[1]
(3 1 2) (14 2 3) 193.2657 51742.240 1.486E-09 R1-----[1]
(3 1 2) (14 2 2) 193.2517 51745.990 2.653E-10 ----rQ21--[1]
(3 1 2) (14 2 1) 193.2572 51744.520 1.769E-11 ----rP31[1]
(3 1 1) (14 2 2) 193.2587 51744.100 7.888E-10 R2-----[1]
(3 1 1) (14 2 1) 193.2642 51742.630 2.629E-10 ----rQ32--[1]
(3 1 0) (14 2 1) 193.2539 51745.410 3.553E-10 R3-----[1]
(3 1 2) (14 4 3) 193.2330 51750.980 0.000E+00 tR31-----[1]
(3 3 2) (14 0 1) 193.3289 51725.330 0.000E+00 ----nP13[3]
(3 3 4) (14 2 3) 193.3174 51728.400 1.915E-09 -----P1[3]
(3 3 3) (14 2 3) 193.3247 51726.450 1.639E-10 ----p12--[3]
(3 3 3) (14 2 2) 193.3107 51730.200 1.311E-09 ----rP31[3]
(3 3 2) (14 2 3) 193.3169 51728.520 4.730E-12 pR13-----[3]
(3 3 2) (14 2 2) 193.3030 51732.270 1.656E-10 ----p23--[3]
(3 3 2) (14 2 1) 193.3084 51730.800 8.941E-10 ----rP31[3]
(3 3 4) (14 4 5) 193.2922 51735.150 2.427E-09 R1-----[3]
(3 3 4) (14 4 4) 193.2782 51738.910 1.241E-10 ----rQ21--[3]

(3 3 4) (14 4 3) 193.2847 51737.140 1.970E-12 -----rP31[3]
(3 3 3) (14 4 4) 193.2854 51736.950 1.844E-09 R2-----[3]
(3 3 3) (14 4 3) 193.2920 51735.190 1.230E-10 -----rQ32--[3]
(3 3 2) (14 4 3) 193.2843 51737.270 1.419E-09 R3-----[3]
(3 3 4) (14 6 5) 193.2451 51747.760 0.000E+00 tr31-----[3]
(3 5 4) (14 2 3) 193.4108 51703.420 0.000E+00 -----nP13[5]
(3 5 6) (14 4 5) 193.3856 51710.160 2.601E-09 -----P1[5]
(3 5 5) (14 4 5) 193.3931 51708.160 8.719E-11 ---pQ12--[5]
(3 5 5) (14 4 4) 193.3790 51711.920 2.093E-09 -----P2[5]
(3 5 4) (14 4 5) 193.3855 51710.170 8.893E-13 pR13-----[5]
(3 5 4) (14 4 4) 193.3715 51713.930 8.805E-11 ---pQ23--[5]
(3 5 4) (14 4 3) 193.3781 51712.160 1.712E-09 -----P3[5]
(3 5 6) (14 6 7) 193.3463 51720.680 3.048E-09 R1-----[5]
(3 5 6) (14 6 6) 193.3319 51724.520 7.338E-11 ---rQ21--[5]
(3 5 6) (14 6 5) 193.3385 51722.760 5.131E-13 -----rP31[5]
(3 5 5) (14 6 6) 193.3394 51722.520 2.544E-09 R2-----[5]
(3 5 5) (14 6 5) 193.3459 51720.770 7.268E-11 ---rQ32--[5]
(3 5 4) (14 6 5) 193.3384 51722.780 2.161E-09 R3-----[5]
(3 5 6) (14 8 7) 193.2843 51737.270 0.000E+00 tr31-----[5]
(3 7 6) (14 4 5) 193.5210 51673.980 0.000E+00 -----nP13[7]
(3 7 8) (14 6 7) 193.4814 51684.540 2.935E-09 -----P1[7]
(3 7 7) (14 6 7) 193.4890 51682.530 5.234E-11 ---pQ12--[7]
(3 7 7) (14 6 6) 193.4746 51686.370 2.512E-09 -----P2[7]
(3 7 6) (14 6 7) 193.4816 51684.500 2.710E-13 pR13-----[7]
(3 7 6) (14 6 6) 193.4672 51688.340 5.284E-11 ---pQ23--[7]
(3 7 6) (14 6 5) 193.4738 51686.580 2.191E-09 -----P3[7]
(3 7 8) (14 8 9) 193.4278 51698.880 3.309E-09 R1-----[7]
(3 7 8) (14 8 8) 193.4131 51702.810 4.626E-11 ---rQ21--[7]
(3 7 8) (14 8 7) 193.4193 51701.140 1.814E-13 -----rP31[7]
(3 7 7) (14 8 8) 193.4206 51700.800 2.886E-09 R2-----[7]
(3 7 7) (14 8 7) 193.4269 51699.120 4.581E-11 ---rQ32--[7]
(3 7 6) (14 8 7) 193.4195 51701.090 2.565E-09 R3-----[7]
(3 7 8) (14 10 9) 193.3509 51719.450 0.000E+00 tr31-----[7]
(3 9 8) (14 6 7) 193.6589 51637.180 0.000E+00 -----nP13[9]
(3 9 10) (14 8 9) 193.6048 51651.620 2.932E-09 -----P1[9]
(3 9 9) (14 8 9) 193.6124 51649.580 3.243E-11 ---pQ12--[9]
(3 9 9) (14 8 8) 193.5977 51653.510 2.594E-09 -----P2[9]
(3 9 8) (14 8 9) 193.6051 51651.520 1.013E-13 pR13-----[9]
(3 9 8) (14 8 8) 193.5904 51655.450 3.274E-11 ---pQ23--[9]
(3 9 8) (14 8 7) 193.5967 51653.780 2.340E-09 -----P3[9]
(3 9 10) (14 10 11) 193.5367 51669.780 3.229E-09 R1-----[9]
(3 9 10) (14 10 10) 193.5218 51673.780 2.949E-11 ---rQ21--[9]
(3 9 10) (14 10 9) 193.5277 51672.190 7.390E-14 -----rP31[9]
(3 9 9) (14 10 10) 193.5294 51671.730 2.891E-09 R2-----[9]
(3 9 9) (14 10 9) 193.5354 51670.140 2.920E-11 ---rQ32--[9]
(3 9 8) (14 10 9) 193.5281 51672.090 2.637E-09 R3-----[9]
(3 9 10) (14 12 11) 193.4452 51694.230 0.000E+00 tr31-----[9]
(3 11 10) (14 8 9) 193.8241 51593.170 0.000E+00 -----nP13[11]
(3 11 12) (14 10 11) 193.7554 51611.470 2.662E-09 -----P1[11]
(3 11 11) (14 10 11) 193.7631 51609.410 2.004E-11 ---pQ12--[11]
(3 11 11) (14 10 10) 193.7481 51613.410 2.405E-09 -----P2[11]
(3 11 10) (14 10 11) 193.7559 51611.330 4.188E-14 pR13-----[11]
(3 11 10) (14 10 10) 193.7409 51615.330 2.023E-11 ---pQ23--[11]
(3 11 12) (14 12 13) 193.6730 51633.420 2.215E-09 -----P3[11]
(3 11 12) (14 12 12) 193.6579 51637.450 2.887E-09 R1-----[11]
(3 11 12) (14 12 11) 193.6636 51635.920 1.856E-11 ---rQ21--[11]
(3 11 11) (14 12 12) 193.6656 51635.390 3.229E-14 -----rP31[11]
(3 11 11) (14 12 11) 193.6714 51633.860 2.629E-09 R2-----[11]
(3 11 10) (14 12 11) 193.6642 51635.780 1.838E-11 ---rQ32--[11]
(3 11 12) (14 14 13) 193.5673 51661.630 2.439E-09 R3-----[11]
(3 13 14) (14 14 15) 193.8375 51589.610 0.000E+00 tr31-----[11]
(3 13 14) (14 14 14) 193.8224 51593.620 2.387E-09 R1-----[13]
(3 13 14) (14 14 13) 193.8281 51592.110 1.139E-11 ---rQ21--[13]
(3 13 13) (14 14 14) 193.8302 51591.540 1.455E-14 -----rP31[13]
(3 13 13) (14 14 13) 193.8359 51590.030 2.199E-09 R2-----[13]
(3 13 12) (14 14 13) 193.8288 51591.930 1.128E-11 ---rQ32--[13]
(3 13 14) (14 16 15) 193.7180 51621.430 2.065E-09 R3-----[13]
(3 15 16) (14 18 17) 193.8968 51573.820 0.000E+00 tr31-----[15]
(3 9 8) (15 6 7) 192.8832 51844.850 0.000E+00 -----nP13[9]
(3 9 10) (15 8 9) 192.8345 51857.940 2.417E-09 -----P1[9]
(3 9 9) (15 8 9) 192.8421 51855.900 2.673E-11 ---pQ12--[9]
(3 9 9) (15 8 8) 192.8239 51860.790 2.139E-09 -----P2[9]
(3 9 8) (15 8 9) 192.8349 51857.840 8.355E-14 pR13-----[9]
(3 9 8) (15 8 8) 192.8167 51862.730 2.699E-11 ---pQ23--[9]
(3 9 8) (15 8 7) 192.8229 51861.070 1.929E-09 -----P3[9]
(3 11 10) (15 8 9) 193.0521 51799.490 0.000E+00 -----nP13[11]
(3 11 12) (15 10 11) 192.9903 51816.090 2.195E-09 -----P1[11]
(3 11 11) (15 10 11) 192.9979 51814.020 1.652E-11 ---pQ12--[11]
(3 11 11) (15 10 10) 192.9795 51818.980 1.983E-09 -----P2[11]
(3 11 10) (15 10 11) 192.9908 51815.950 3.453E-14 pR13-----[11]
(3 11 10) (15 10 10) 192.9723 51820.910 1.668E-11 ---pQ23--[11]
(3 11 10) (15 10 9) 192.9782 51819.340 1.826E-09 -----P3[11]
(3 11 12) (15 12 13) 192.9162 51835.980 2.380E-09 R1-----[11]
(3 11 12) (15 12 12) 192.8977 51840.950 1.530E-11 ---rQ21--[11]
(3 11 12) (15 12 11) 192.9033 51839.440 2.662E-14 -----rP31[11]
(3 11 11) (15 12 12) 192.9054 51838.890 2.167E-09 R2-----[11]
(3 11 11) (15 12 11) 192.9110 51837.380 1.515E-11 ---rQ32--[11]
(3 11 10) (15 12 11) 192.9039 51839.300 2.011E-09 R3-----[11]
(3 11 12) (15 14 13) 192.8170 51862.650 0.000E+00 tr31-----[11]
(3 13 12) (15 10 11) 193.2502 51746.390 0.000E+00 -----nP13[13]
(3 13 14) (15 12 13) 193.1752 51766.470 1.835E-09 -----P1[13]
(3 13 13) (15 12 13) 193.1830 51764.390 1.001E-11 ---pQ12--[13]
(3 13 13) (15 12 12) 193.1645 51769.350 1.681E-09 -----P2[13]
(3 13 12) (15 12 13) 193.1759 51766.290 1.496E-14 pR13-----[13]
(3 13 12) (15 12 12) 193.1574 51771.250 1.010E-11 ---pQ23--[13]
(3 13 12) (15 12 11) 193.1630 51769.740 1.570E-09 -----P3[13]
(3 13 14) (15 14 15) 193.0883 51789.780 1.967E-09 R1-----[13]
(3 13 14) (15 14 14) 193.0701 51794.660 9.391E-12 ---rQ21--[13]

(3 13 14) (15 14 13) 193.0758 51793.130 1.199E-14 -----rP31[13]
(3 13 13) (15 14 14) 193.0779 51792.570 1.813E-09 R2-----[13]
(3 13 13) (15 14 13) 193.0836 51791.050 9.297E-12 ---rQ32--[13]
(3 13 12) (15 14 13) 193.0765 51792.950 1.703E-09 R3-----[13]
(3 13 14) (15 16 15) 192.9775 51819.510 0.000E+00 tr31-----[13]
(3 15 14) (15 12 13) 193.4767 51685.800 0.000E+00 -----nP13[15]
(3 15 16) (15 14 15) 193.3887 51709.340 1.425E-09 -----P1[15]
(3 15 15) (15 14 15) 193.3965 51707.230 5.890E-12 ---pQ12--[15]
(3 15 15) (15 14 14) 193.3783 51712.120 1.319E-09 -----P2[15]
(3 15 14) (15 14 15) 193.3895 51709.110 6.611E-15 pR13-----[15]
(3 15 14) (15 14 14) 193.3713 51713.990 5.944E-12 ---pQ23--[15]
(3 15 14) (15 14 13) 193.3770 51712.470 1.245E-09 -----P3[15]
(3 15 16) (15 16 17) 193.2890 51736.010 1.515E-09 R1-----[15]
(3 15 16) (15 16 16) 193.2715 51740.700 5.581E-12 ---rQ21--[15]
(3 15 16) (15 16 15) 193.2775 51739.070 5.455E-15 -----rP31[15]
(3 15 15) (15 16 16) 193.2793 51738.600 1.409E-09 R2-----[15]
(3 15 15) (15 16 15) 193.2854 51736.970 5.525E-12 ---rQ32--[15]
(3 15 14) (15 16 15) 193.2784 51738.850 1.335E-09 R3-----[15]
(3 15 16) (15 18 17) 193.1676 51768.520 0.000E+00 tr31-----[15]
(3 17 16) (15 14 15) 193.7335 51617.310 0.000E+00 -----nP13[17]
(3 17 18) (15 16 17) 193.6324 51644.250 1.031E-09 -----P1[17]
(3 17 17) (15 16 17) 193.6404 51642.130 3.342E-12 ---pQ12--[17]
(3 17 17) (15 16 16) 193.6228 51646.810 9.626E-10 -----P2[17]
(3 17 16) (15 16 17) 193.6334 51643.980 2.919E-15 pR13-----[17]
(3 17 16) (15 16 16) 193.6158 51648.670 3.372E-12 ---pQ23--[17]
(3 17 16) (15 16 15) 193.6219 51647.040 9.155E-10 -----P3[17]
(3 17 18) (15 18 19) 193.5201 51674.230 1.090E-09 R1-----[17]
(3 17 18) (15 18 18) 193.5037 51678.600 3.191E-12 ---rQ21--[17]
(3 17 18) (15 18 17) 193.5106 51676.750 2.464E-15 -----rP31[17]
(3 17 17) (15 18 18) 193.5116 51676.480 1.020E-09 R2-----[17]
(3 17 17) (15 18 17) 193.5186 51674.630 3.158E-12 ---rQ32--[17]
(3 17 16) (15 18 17) 193.5116 51676.490 9.735E-10 R3-----[17]
(3 17 18) (15 20 19) 193.3893 51709.180 0.000E+00 tr31-----[17]
(3 19 19) (15 18 18) 193.8961 51574.010 6.577E-10 -----P2[19]
(3 19 18) (15 18 18) 193.8892 51575.850 1.843E-12 ---pQ23--[19]
(3 19 18) (15 18 17) 193.8961 51574.000 6.294E-10 -----P3[19]
(3 19 20) (15 20 21) 193.7797 51604.990 7.360E-10 R1-----[19]
(3 19 20) (15 20 20) 193.7650 51608.910 1.755E-12 ---rQ21--[19]
(3 19 19) (15 20 19) 193.7732 51606.730 1.097E-15 -----rP31[19]
(3 19 19) (15 20 20) 193.7730 51606.770 6.929E-10 R2-----[19]
(3 19 19) (15 20 19) 193.7812 51604.590 1.736E-12 ---rQ32--[19]
(3 19 18) (15 20 19) 193.7743 51606.430 6.648E-10 R3-----[19]
(3 19 20) (15 22 21) 193.6408 51642.010 0.000E+00 tr31-----[19]
(3 15 14) (16 12 13) 192.8787 51846.060 0.000E+00 -----nP13[15]
(3 15 16) (16 14 15) 192.8011 51866.910 1.134E-09 -----P1[15]
(3 15 15) (16 14 15) 192.8089 51864.810 4.688E-12 ---pQ12--[15]
(3 15 14) (16 14 15) 192.8020 51866.690 5.262E-15 pR13-----[15]
(3 17 16) (16 14 15) 193.1438 51774.880 0.000E+00 -----nP13[17]
(3 17 18) (16 16 17) 193.0550 51798.720 8.210E-10 -----P1[17]
(3 17 17) (16 16 17) 193.0629 51796.600 2.660E-12 ---pQ12--[17]
(3 17 17) (16 16 16) 193.0373 51803.460 7.662E-10 -----P2[17]
(3 17 16) (16 16 17) 193.0559 51798.460 2.324E-15 pR13-----[17]
(3 17 16) (16 16 16) 193.0303 51805.320 2.684E-12 ---pQ23--[17]
(3 17 16) (16 16 15) 193.0344 51804.240 7.287E-10 -----P3[17]
(3 17 18) (16 18 19) 192.9564 51825.170 8.672E-10 R1-----[17]
(3 17 18) (16 18 18) 192.9317 51831.820 2.540E-12 ---rQ21--[17]
(3 17 18) (16 18 17) 192.9361 51830.630 1.961E-15 -----rP31[17]
(3 17 17) (16 18 18) 192.9396 51829.700 8.120E-10 R2-----[17]
(3 17 17) (16 18 17) 192.9440 51828.510 2.514E-12 ---rQ32--[17]
(3 17 16) (16 18 17) 192.9371 51830.370 7.749E-10 R3-----[17]
(3 17 18) (16 20 19) 192.8295 51859.280 0.000E+00 tr31-----[17]
(3 19 18) (16 16 17) 193.4387 51695.970 0.000E+00 -----nP13[19]
(3 19 20) (16 18 19) 193.3387 51722.710 5.575E-10 -----P1[19]
(3 19 19) (16 18 19) 193.3466 51720.580 1.454E-12 ---pQ12--[19]
(3 19 19) (16 18 18) 193.3218 51727.230 5.235E-10 -----P2[19]
(3 19 18) (16 18 19) 193.3398 51722.420 1.016E-15 pR13-----[19]
(3 19 18) (16 18 18) 193.3149 51729.070 1.467E-12 ---pQ23--[19]
(3 19 18) (16 18 17) 193.3194 51727.880 5.009E-10 -----P3[19]
(3 19 20) (16 20 21) 193.2294 51751.950 5.857E-10 R1-----[19]
(3 19 20) (16 20 20) 193.2059 51758.250 1.396E-12 ---rQ21--[19]
(3 19 20) (16 20 19) 193.2112 51756.820 8.733E-16 -----rP31[19]
(3 19 19) (16 20 20) 193.2139 51756.110 5.515E-10 R2-----[19]
(3 19 19) (16 20 19) 193.2192 51754.690 1.382E-12 ---rQ32--[19]
(3 19 18) (16 20 19) 193.2123 51756.530 5.292E-10 R3-----[19]
(3 19 20) (16 22 21) 193.0955 51787.850 0.000E+00 tr31-----[19]
(3 21 20) (16 18 19) 193.7658 51608.680 0.000E+00 -----nP13[21]
(3 21 22) (16 20 21) 193.6549 51638.250 3.550E-10 -----P1[21]
(3 21 21) (16 20 21) 193.6630 51636.090 7.612E-13 ---pQ12--[21]
(3 21 21) (16 20 20) 193.6394 51642.390 3.350E-10 -----P2[21]
(3 21 20) (16 20 21) 193.6561 51637.920 4.356E-16 pR13-----[21]
(3 21 20) (16 20 20) 193.6325 51644.210 7.680E-13 ---pQ23--[21]
(3 21 20) (16 20 19) 193.6379 51642.790 3.222E-10 -----P3[21]
(3 21 22) (16 22 23) 193.5352 51670.180 3.714E-10 R1-----[21]
(3 21 22) (16 22 22) 193.5136 51675.950 7.347E-13 ---rQ21--[21]
(3 21 22) (16 22 21) 193.5204 51674.150 3.797E-16 -----rP31[21]
(3 21 21) (16 22 22) 193.5217 51673.800 3.512E-10 R2-----[21]
(3 21 21) (16 22 21) 193.5284 51671.990 7.271E-13 ---rQ32--[21]
(3 21 20) (16 22 21) 193.5216 51673.820 3.385E-10 R3-----[21]
(3 21 22) (16 24 23) 193.3959 51707.410 0.000E+00 tr31-----[21]
(3 23 24) (16 24 25) 193.8737 51579.980 2.216E-10 R1-----[23]
(3 23 24) (16 24 24) 193.8546 51585.060 3.697E-13 ---rQ21--[23]
(3 23 24) (16 24 23) 193.8634 51582.710 1.605E-16 -----rP31[23]
(3 23 23) (16 24 24) 193.8628 51582.880 2.104E-10 R2-----[23]
(3 23 23) (16 24 23) 193.8716 51580.540 3.658E-13 ---rQ32--[23]
(3 23 22) (16 24 23) 193.8648 51582.340 2.035E-10 R3-----[23]
(3 23 24) (16 26 25) 193.7307 51618.050 0.000E+00 tr31-----[23]
(3 19 18) (17 16 17) 193.0066 51811.700 0.000E+00 -----nP13[19]
(3 19 20) (17 18 19) 192.9231 51834.120 4.280E-10 -----P1[19]


```

( 3 19 19) ( 17 18 19) 192.9311 51831.980 1.116E-12 ----pQ12-- [ 19]
( 3 19 19) ( 17 18 18) 192.8851 51844.330 4.019E-10 ----P2 [ 19]
( 3 19 18) ( 17 18 19) 192.9242 51833.820 7.804E-16 pR13----- [ 19]
( 3 19 18) ( 17 18 18) 192.8783 51846.170 1.126E-12 ----pQ23-- [ 19]
( 3 19 18) ( 17 18 17) 192.8720 51847.860 3.847E-10 ----P3 [ 19]
( 3 19 20) ( 17 20 21) 192.8326 51858.450 4.497E-10 R1----- [ 19]
( 3 21 20) ( 17 18 19) 193.3485 51720.090 0.000E+00 ----nP13 [ 21]
( 3 21 22) ( 17 20 21) 193.2563 51744.750 2.725E-10 ----P1 [ 21]
( 3 21 21) ( 17 20 21) 193.2644 51742.590 5.844E-13 ----pQ12-- [ 21]
( 3 21 21) ( 17 20 20) 193.2158 51755.590 2.572E-10 ----P2 [ 21]
( 3 21 20) ( 17 20 21) 193.2576 51744.420 3.344E-16 pR13----- [ 21]
( 3 21 20) ( 17 20 20) 193.2090 51757.420 5.897E-13 ----pQ23-- [ 21]
( 3 21 20) ( 17 20 19) 193.2003 51759.750 2.474E-10 ----P3 [ 21]
( 3 21 22) ( 17 22 23) 193.1577 51771.160 2.851E-10 R1----- [ 21]
( 3 21 22) ( 17 22 22) 193.1068 51784.820 5.641E-13 ----rQ21-- [ 21]
( 3 21 22) ( 17 22 21) 193.0957 51787.800 2.915E-16 ----rP31 [ 21]
( 3 21 21) ( 17 22 22) 193.1148 51782.660 2.696E-10 R2----- [ 21]
( 3 21 21) ( 17 22 21) 193.1037 51785.650 5.583E-13 ----rQ32-- [ 21]
( 3 21 20) ( 17 22 21) 193.0969 51787.470 2.599E-10 R3----- [ 21]
( 3 21 22) ( 17 24 23) 192.9850 51817.490 0.000E+00 tR31----- [ 21]
( 3 23 22) ( 17 20 21) 193.7246 51619.680 0.000E+00 ----nP13 [ 23]
( 3 23 24) ( 17 22 23) 193.6241 51646.460 1.632E-10 ----P1 [ 23]
( 3 23 23) ( 17 22 23) 193.6323 51644.290 2.928E-13 ----pQ12-- [ 23]
( 3 23 23) ( 17 22 22) 193.5811 51657.950 1.546E-10 ----P2 [ 23]
( 3 23 22) ( 17 22 23) 193.6255 51646.090 1.396E-16 pR13----- [ 23]
( 3 23 22) ( 17 22 22) 193.5743 51659.750 2.954E-13 ----pQ23-- [ 23]
( 3 23 22) ( 17 22 21) 193.5631 51662.730 1.493E-10 ----P3 [ 23]
( 3 23 24) ( 17 24 25) 193.5179 51674.820 1.701E-10 R1----- [ 23]
( 3 23 24) ( 17 24 24) 193.4642 51689.140 2.838E-13 ----rQ21-- [ 23]
( 3 23 24) ( 17 24 23) 193.4506 51692.790 1.232E-16 ----rP31 [ 23]
( 3 23 23) ( 17 24 24) 193.4724 51686.970 1.615E-10 R2----- [ 23]
( 3 23 23) ( 17 24 23) 193.4587 51690.610 2.809E-13 ----rQ32-- [ 23]
( 3 23 22) ( 17 24 23) 193.4520 51692.420 1.562E-10 R3----- [ 23]
( 3 23 24) ( 17 26 25) 193.3328 51724.280 0.000E+00 tR31----- [ 23]
( 3 25 26) ( 17 26 26) 193.8576 51584.260 1.364E-13 ----rQ21-- [ 25]
( 3 25 26) ( 17 26 25) 193.8414 51588.570 5.045E-17 ----rP31 [ 25]
( 3 25 25) ( 17 26 26) 193.8658 51582.070 9.108E-11 R2----- [ 25]
( 3 25 25) ( 17 26 25) 193.8496 51586.380 1.349E-13 ----rQ32-- [ 25]
( 3 25 24) ( 17 26 25) 193.8429 51588.160 8.840E-11 R3----- [ 25]
( 3 25 26) ( 17 28 27) 193.7169 51621.710 0.000E+00 tR31----- [ 25]

( 3 21 20) ( 18 18 19) 192.9679 51822.100 0.000E+00 ----nP13 [ 21]
( 3 21 22) ( 18 20 21) 192.8761 51846.770 2.046E-10 ----P1 [ 21]
( 3 21 21) ( 18 20 21) 192.8841 51844.610 4.388E-13 ----pQ12-- [ 21]
( 3 21 21) ( 18 20 20) 192.8357 51857.610 1.931E-10 ----P2 [ 21]
( 3 21 20) ( 18 20 21) 192.8773 51846.430 2.511E-16 pR13----- [ 21]
( 3 21 20) ( 18 20 20) 192.8290 51859.430 4.428E-13 ----pQ23-- [ 21]
( 3 21 20) ( 18 20 19) 192.8203 51861.760 1.858E-10 ----P3 [ 21]
( 3 23 22) ( 18 20 21) 193.3425 51721.690 0.000E+00 ----nP13 [ 23]
( 3 23 24) ( 18 22 23) 193.2424 51748.470 1.225E-10 ----P1 [ 23]
( 3 23 23) ( 18 22 23) 193.2505 51746.300 2.199E-13 ----pQ12-- [ 23]
( 3 23 23) ( 18 22 22) 193.1995 51759.960 1.161E-10 ----P2 [ 23]
( 3 23 22) ( 18 22 23) 193.2438 51748.100 1.049E-16 pR13----- [ 23]
( 3 23 22) ( 18 22 22) 193.1928 51761.760 2.219E-13 ----pQ23-- [ 23]
( 3 23 22) ( 18 22 21) 193.1817 51764.750 1.122E-10 ----P3 [ 23]
( 3 23 24) ( 18 24 25) 193.1366 51776.830 1.277E-10 R1----- [ 23]
( 3 23 24) ( 18 24 24) 193.0832 51791.160 2.131E-13 ----rQ21-- [ 23]
( 3 23 24) ( 18 24 23) 193.0696 51794.800 9.254E-17 ----rP31 [ 23]
( 3 23 23) ( 18 24 24) 193.0913 51788.980 1.213E-10 R2----- [ 23]
( 3 23 23) ( 18 24 23) 193.0777 51792.630 2.109E-13 ----rQ32-- [ 23]
( 3 23 22) ( 18 24 23) 193.0710 51794.430 1.173E-10 R3----- [ 23]
( 3 23 24) ( 18 26 25) 192.9523 51826.290 0.000E+00 tR31----- [ 23]
( 3 25 24) ( 18 22 23) 193.7521 51612.360 0.000E+00 ----nP13 [ 25]
( 3 25 26) ( 18 24 25) 193.6441 51641.120 6.911E-11 ----P1 [ 25]
( 3 25 25) ( 18 24 25) 193.6524 51638.930 1.053E-13 ----pQ12-- [ 25]
( 3 25 25) ( 18 24 24) 193.5986 51653.250 6.572E-11 ----P2 [ 25]
( 3 25 24) ( 18 24 25) 193.6457 51640.710 4.250E-17 pR13----- [ 25]
( 3 25 24) ( 18 24 24) 193.5919 51655.040 1.062E-13 ----pQ23-- [ 25]
( 3 25 24) ( 18 24 23) 193.5783 51658.680 6.369E-11 ----P3 [ 25]
( 3 25 26) ( 18 26 27) 193.5311 51671.270 7.181E-11 R1----- [ 25]
( 3 25 26) ( 18 26 26) 193.4750 51686.270 1.024E-13 ----rQ21-- [ 25]
( 3 25 26) ( 18 26 25) 193.4588 51690.580 3.789E-17 ----rP31 [ 25]
( 3 25 25) ( 18 26 26) 193.4832 51684.080 6.840E-11 R2----- [ 25]
( 3 25 25) ( 18 26 25) 193.4670 51688.390 1.013E-13 ----rQ32-- [ 25]
( 3 25 24) ( 18 26 25) 193.4604 51690.180 6.638E-11 R3----- [ 25]
( 3 25 26) ( 18 28 27) 193.3349 51723.720 0.000E+00 tR31----- [ 25]
( 3 27 28) ( 18 28 27) 193.8847 51577.050 1.498E-17 ----rP31 [ 27]
( 3 27 27) ( 18 28 27) 193.8930 51574.840 4.646E-14 ----rQ32-- [ 27]
( 3 27 26) ( 18 28 27) 193.8863 51576.610 3.540E-11 R3----- [ 27]
( 3 27 28) ( 18 30 29) 193.7547 51611.660 0.000E+00 tR31----- [ 27]

( 3 23 22) ( 19 20 21) 193.0598 51797.410 0.000E+00 ----nP13 [ 23]
( 3 23 24) ( 19 22 23) 192.9601 51824.190 8.929E-11 ----P1 [ 23]
( 3 23 23) ( 19 22 23) 192.9682 51822.020 1.602E-13 ----pQ12-- [ 23]
( 3 23 23) ( 19 22 22) 192.9173 51835.680 8.462E-11 ----P2 [ 23]
( 3 23 22) ( 19 22 23) 192.9615 51823.820 7.641E-17 pR13----- [ 23]
( 3 23 22) ( 19 22 22) 192.9106 51837.480 1.617E-13 ----pQ23-- [ 23]
( 3 23 22) ( 19 22 21) 192.8995 51840.460 8.172E-11 ----P3 [ 23]
( 3 23 24) ( 19 24 25) 192.8546 51852.550 9.307E-11 R1----- [ 23]
( 3 23 24) ( 19 24 24) 192.8013 51866.880 1.553E-13 ----rQ21-- [ 23]
( 3 23 23) ( 19 24 24) 192.8094 51864.700 8.836E-11 R2----- [ 23]
( 3 25 24) ( 19 22 23) 193.4682 51688.070 0.000E+00 ----nP13 [ 25]
( 3 25 26) ( 19 24 25) 193.3606 51716.840 5.036E-11 ----P1 [ 25]
( 3 25 25) ( 19 24 25) 193.3688 51714.640 7.672E-14 ----pQ12-- [ 25]
( 3 25 25) ( 19 24 24) 193.3153 51728.970 4.789E-11 ----P2 [ 25]
( 3 25 24) ( 19 24 25) 193.3622 51716.430 3.096E-17 pR13----- [ 25]
( 3 25 24) ( 19 24 24) 193.3086 51730.760 7.740E-14 ----pQ23-- [ 25]
( 3 25 24) ( 19 24 23) 193.2950 51734.400 4.640E-11 ----P3 [ 25]
( 3 25 26) ( 19 26 27) 193.2480 51746.990 5.233E-11 R1----- [ 25]
( 3 25 26) ( 19 26 26) 193.1920 51761.990 7.461E-14 ----rQ21-- [ 25]

```

```

( 3 25 26) ( 19 26 25) 193.1759 51766.300 2.761E-17 ----rP31 [ 25]
( 3 25 25) ( 19 26 26) 193.2001 51759.800 4.984E-11 R2----- [ 25]
( 3 25 25) ( 19 26 25) 193.1841 51764.110 7.384E-14 ----rQ32-- [ 25]
( 3 25 24) ( 19 26 25) 193.1774 51765.890 4.837E-11 R3----- [ 25]
( 3 25 26) ( 19 28 27) 193.0523 51799.440 0.000E+00 tR31----- [ 25]
( 3 27 28) ( 19 26 27) 193.7972 51600.320 2.678E-11 ----P1 [ 27]
( 3 27 27) ( 19 26 27) 193.8056 51598.110 3.507E-14 ----pQ12-- [ 27]
( 3 27 27) ( 19 26 26) 193.7492 51613.110 2.554E-11 ----P2 [ 27]
( 3 27 26) ( 19 26 27) 193.7989 51599.880 1.213E-17 pR13----- [ 27]
( 3 27 26) ( 19 26 26) 193.7426 51614.880 3.538E-14 ----pQ23-- [ 27]
( 3 27 26) ( 19 26 25) 193.7264 51619.190 2.482E-11 ----P3 [ 27]
( 3 27 28) ( 19 28 29) 193.6779 51632.110 2.776E-11 R1----- [ 27]
( 3 27 28) ( 19 28 28) 193.6191 51647.790 3.421E-14 ----rQ21-- [ 27]
( 3 27 28) ( 19 28 27) 193.6005 51652.770 1.091E-17 ----rP31 [ 27]
( 3 27 27) ( 19 28 28) 193.6274 51645.570 2.651E-11 R2----- [ 27]
( 3 27 27) ( 19 28 27) 193.6087 51650.560 3.385E-14 ----rQ32-- [ 27]
( 3 27 26) ( 19 28 27) 193.6021 51652.330 2.580E-11 R3----- [ 27]
( 3 27 28) ( 19 30 29) 193.4708 51687.380 0.000E+00 tR31----- [ 27]

( 3 23 22) ( 20 20 21) 192.8640 51850.010 0.000E+00 ----nP13 [ 23]
( 3 25 24) ( 20 22 23) 193.2715 51740.680 0.000E+00 ----nP13 [ 25]
( 3 25 26) ( 20 24 25) 193.1642 51769.440 3.144E-11 ----P1 [ 25]
( 3 25 25) ( 20 24 25) 193.1723 51767.250 4.789E-14 ----pQ12-- [ 25]
( 3 25 25) ( 20 24 24) 193.1189 51781.570 2.989E-11 ----P2 [ 25]
( 3 25 24) ( 20 24 25) 193.1657 51769.030 1.933E-17 pR13----- [ 25]
( 3 25 24) ( 20 24 24) 193.1122 51783.360 4.832E-14 ----pQ23-- [ 25]
( 3 25 24) ( 20 24 23) 193.0986 51787.000 2.897E-11 ----P3 [ 25]
( 3 25 26) ( 20 26 27) 193.0517 51799.590 3.267E-11 R1----- [ 25]
( 3 25 26) ( 20 26 26) 192.9958 51814.590 4.658E-14 ----rQ21-- [ 25]
( 3 25 26) ( 20 26 25) 192.9798 51818.900 1.723E-17 ----rP31 [ 25]
( 3 25 25) ( 20 26 26) 193.0040 51812.400 3.111E-11 R2----- [ 25]
( 3 25 25) ( 20 26 25) 192.9879 51816.710 4.610E-14 ----rQ32-- [ 25]
( 3 25 24) ( 20 26 25) 192.9813 51818.500 3.020E-11 R3----- [ 25]
( 3 25 26) ( 20 28 27) 192.8564 51852.040 0.000E+00 tR31----- [ 25]
( 3 27 26) ( 20 24 25) 193.7146 51622.330 0.000E+00 ----nP13 [ 27]
( 3 27 28) ( 20 26 27) 193.5999 51652.920 1.672E-11 ----P1 [ 27]
( 3 27 27) ( 20 26 27) 193.6082 51650.710 2.190E-14 ----pQ12-- [ 27]
( 3 27 27) ( 20 26 26) 193.5520 51665.710 1.594E-11 ----P2 [ 27]
( 3 27 26) ( 20 26 27) 193.6015 51652.480 7.576E-18 pR13----- [ 27]
( 3 27 26) ( 20 26 26) 193.5453 51667.480 2.209E-14 ----pQ23-- [ 27]
( 3 27 26) ( 20 26 25) 193.5292 51671.790 1.550E-11 ----P3 [ 27]
( 3 27 28) ( 20 28 29) 193.4808 51684.710 1.733E-11 R1----- [ 27]
( 3 27 28) ( 20 28 28) 193.4221 51700.390 2.136E-14 ----rQ21-- [ 27]
( 3 27 28) ( 20 28 27) 193.4035 51705.370 6.814E-18 ----rP31 [ 27]
( 3 27 27) ( 20 28 28) 193.4304 51698.180 1.655E-11 R2----- [ 27]
( 3 27 27) ( 20 28 27) 193.4118 51703.160 2.114E-14 ----rQ32-- [ 27]
( 3 27 26) ( 20 28 27) 193.4052 51704.930 1.610E-11 R3----- [ 27]
( 3 27 28) ( 20 30 29) 193.2742 51739.980 0.000E+00 tR31----- [ 27]
( 3 29 30) ( 20 30 30) 193.8861 51576.670 9.338E-15 ----rQ21-- [ 29]
( 3 29 30) ( 20 30 29) 193.8648 51582.330 2.595E-18 ----rP31 [ 29]
( 3 29 29) ( 20 30 30) 193.8945 51574.440 8.305E-12 R2----- [ 29]
( 3 29 29) ( 20 30 29) 193.8732 51580.110 9.239E-15 ----rQ32-- [ 29]
( 3 29 28) ( 20 30 29) 193.8666 51581.860 8.101E-12 R3----- [ 29]

v SCHWINGUNGSBESETZUNG [%]
0 99.94
1 .06
2 .00
3 .00

PARTITION FUNCTION( Zvib*Zrot ) : 438.9
PARTITION FUNCTION( Zvib ) : 1.0
PARTITION FUNCTION( Zrot ) : 438.6
BESETZUNGSGRENZE NICHT ERREICHT !
MAX. ROTATIONSBESETZUNG: J= 8 .0%
MIN. WELLENLAENGE (NM): 192.80NM
MAX. WELLENLAENGE (NM): 193.90NM
VIBRATIONSTEMPERATUR= 300. K
ROTATIONSTEMPERATUR= 300. K
VXMIN= 0 VXMAX= 3
VAMIN= 0 VAMAX= 20
KMIN= 0 KMAX= 30

IGVEQ =1
Data by D.M.Creek is used.
IGREQ =2
Eq. by Schlapp is used.
IAVEQ =1
Data by D.M.Creek is used.
IAREQ =2
Eq. by Cheung is used.

```


The Schumann-Runge Bands (192.8nm - 193.9nm)

No.	X3sigma V K J	B3sigma V K J	Wave Length [nm]	Intensity [1/cm]	Band	Branch
1	3 15 16(16 14 15)	192.8011	51866.91	1.134E-09	(16, 3)	----P1[15]
2	3 23 24(19 24 24)	192.8013	51866.88	1.553E-13	(19, 3)	--rQ21-[23]
3	3 15 14(16 14 15)	192.8020	51866.69	5.262E-15	(16, 3)	pr13--[15]
4	0 13 13(4 14 13)	192.8049	51865.91	7.016E-06	(4, 0)	--rQ32-[13]
5	0 11 10(4 10 10)	192.8050	51865.87	1.272E-05	(4, 0)	--pQ23-[11]
6	3 15 15(16 14 15)	192.8090	51864.81	4.688E-12	(16, 3)	--pQ12-[15]
7	3 23 23(19 24 24)	192.8094	51864.70	8.836E-11	(19, 3)	R2----[23]
8	0 11 10(4 10 9)	192.8105	51864.40	1.393E-03	(4, 0)	----P3[11]
9	0 11 12(4 10 11)	192.8119	51864.01	1.674E-03	(4, 0)	----P1[11]
10	0 11 11(4 10 10)	192.8122	51863.95	1.512E-03	(4, 0)	----P2[11]
11	0 11 10(4 10 11)	192.8124	51863.88	2.634E-08	(4, 0)	pr13--[11]
12	2 29 28(12 26 27)	192.8140	51863.46	0.000E+00	(12, 2)	--nP13[29]
13	1 21 22(7 24 23)	192.8147	51863.27	0.000E+00	(7, 1)	tr31--[21]
14	3 9 8(15 8 8)	192.8167	51862.73	2.699E-11	(15, 3)	--pQ23-[9]
15	3 11 12(15 14 13)	192.8170	51862.65	0.000E+00	(15, 3)	tr31--[11]
16	2 9 8(10 6 7)	192.8179	51862.41	0.000E+00	(10, 2)	--nP13[9]
17	0 11 11(4 10 11)	192.8196	51861.95	1.260E-05	(4, 0)	--pQ12-[11]
18	3 21 20(18 20 19)	192.8203	51861.76	1.858E-10	(18, 3)	----P3[21]
19	3 9 8(15 8 7)	192.8229	51861.07	1.929E-09	(15, 3)	----P3[9]
20	3 9 9(15 8 8)	192.8239	51860.79	2.139E-09	(15, 3)	----P2[9]
21	3 21 20(18 20 20)	192.8290	51859.43	4.428E-13	(18, 3)	--pQ23-[21]
22	3 17 18(16 20 19)	192.8295	51859.28	0.000E+00	(16, 3)	tr31--[17]
23	3 19 20(17 20 21)	192.8326	51858.45	4.497E-10	(17, 3)	R1----[19]
24	3 9 10(15 8 9)	192.8345	51857.94	2.417E-09	(15, 3)	----P1[9]
25	1 17 16(7 16 16)	192.8348	51857.87	2.596E-07	(7, 1)	--pQ23-[17]
26	3 9 8(15 8 9)	192.8349	51857.84	8.355E-14	(15, 3)	pr13--[9]
27	3 21 21(18 20 20)	192.8357	51857.61	1.931E-10	(18, 3)	----P2[21]
28	1 17 16(7 16 15)	192.8402	51856.40	7.049E-05	(7, 1)	----P3[17]
29	1 19 20(7 20 20)	192.8409	51856.23	1.337E-07	(7, 1)	--rQ21-[19]
30	1 17 17(7 16 16)	192.8417	51856.01	7.411E-05	(7, 1)	----P2[17]
31	1 17 18(7 16 17)	192.8420	51855.93	7.942E-05	(7, 1)	----P1[17]
32	3 9 9(15 8 9)	192.8421	51855.90	2.673E-11	(15, 3)	--pQ12-[9]
33	1 17 16(7 16 17)	192.8429	51855.68	2.248E-10	(7, 1)	pr13--[17]
34	1 19 20(7 20 19)	192.8460	51854.84	8.361E-11	(7, 1)	--rP31[19]
35	2 25 26(11 26 26)	192.8462	51854.80	2.085E-10	(11, 2)	--rQ21-[25]
36	1 19 18(7 20 19)	192.8472	51854.54	5.066E-05	(7, 1)	R3----[19]
37	1 19 19(7 20 20)	192.8488	51854.09	5.280E-05	(7, 1)	R2----[19]
38	1 19 20(7 20 21)	192.8493	51853.95	5.608E-05	(7, 1)	R1----[19]
39	1 17 17(7 16 17)	192.8498	51853.82	2.573E-07	(7, 1)	--pQ12-[17]
40	2 25 26(11 26 25)	192.8505	51853.65	7.713E-14	(11, 2)	--rP31[25]
41	2 25 24(11 26 25)	192.8519	51853.25	1.351E-07	(11, 2)	R3----[25]
42	1 19 19(7 20 19)	192.8540	51852.70	1.323E-07	(7, 1)	--rQ32-[19]
43	2 25 25(11 26 26)	192.8543	51852.61	1.392E-07	(11, 2)	R2----[25]
44	3 23 24(19 24 25)	192.8545	51852.55	9.307E-11	(19, 3)	R1----[23]
45	3 25 26(20 28 27)	192.8564	51852.04	0.000E+00	(20, 3)	tr31--[25]
46	2 25 26(11 26 27)	192.8582	51851.57	1.462E-07	(11, 2)	R1----[25]
47	2 25 25(11 26 25)	192.8586	51851.46	2.063E-10	(11, 2)	--rQ32-[25]
48	3 23 22(20 20 21)	192.8640	51850.01	0.000E+00	(20, 3)	--nP13[23]
49	2 11 10(10 10 10)	192.8701	51848.37	1.410E-08	(10, 2)	--pQ23-[11]
50	0 17 18(4 20 19)	192.8715	51847.98	0.000E+00	(4, 0)	tr31--[17]
51	3 19 18(17 18 17)	192.8720	51847.86	3.847E-10	(17, 3)	----P3[19]
52	3 21 22(18 20 21)	192.8761	51846.77	2.046E-10	(18, 3)	----P1[21]
53	2 11 10(10 10 9)	192.8762	51846.74	1.544E-06	(10, 2)	----P3[11]
54	2 11 11(10 10 10)	192.8772	51846.45	1.677E-06	(10, 2)	----P2[11]
55	3 21 20(18 20 21)	192.8773	51846.43	2.511E-16	(18, 3)	pr13--[21]
56	3 19 18(17 18 18)	192.8783	51846.17	1.126E-12	(17, 3)	--pQ23-[19]
57	3 15 14(16 12 13)	192.8787	51846.06	0.000E+00	(16, 3)	--nP13[15]
58	2 11 12(10 10 11)	192.8793	51845.90	1.856E-06	(10, 2)	----P1[11]
59	2 11 10(10 10 11)	192.8798	51845.76	2.920E-11	(10, 2)	pr13--[11]
60	3 9 8(15 6 7)	192.8832	51844.85	0.000E+00	(15, 3)	--nP13[9]
61	3 21 21(18 20 21)	192.8841	51844.61	4.388E-13	(18, 3)	--pQ12-[21]
62	3 19 19(17 18 18)	192.8851	51844.33	4.019E-10	(17, 3)	----P2[19]
63	2 11 11(10 10 11)	192.8869	51843.84	1.397E-08	(10, 2)	--pQ12-[11]
64	3 11 12(15 12 12)	192.8977	51840.95	1.531E-11	(15, 3)	--rQ21-[11]
65	3 13 14(10 14 14)	192.8993	51840.52	7.915E-09	(10, 2)	--rQ21-[13]
66	3 23 22(19 22 21)	192.8995	51840.46	8.172E-11	(19, 3)	----P3[23]
67	2 15 16(10 18 17)	192.9020	51839.80	0.000E+00	(10, 2)	tr31--[15]
68	3 11 12(15 12 11)	192.9033	51839.44	2.662E-14	(15, 3)	--rP31[11]
69	3 11 10(15 12 11)	192.9038	51839.30	2.011E-09	(15, 3)	R3----[11]
70	2 13 14(10 14 13)	192.9048	51839.05	1.011E-11	(10, 2)	--rP31[13]
71	3 11 11(15 12 12)	192.9054	51838.89	2.167E-09	(15, 3)	R2----[11]
72	2 13 12(10 14 13)	192.9055	51838.86	1.435E-06	(10, 2)	R3----[13]
73	1 29 28(8 26 27)	192.9055	51838.84	0.000E+00	(8, 1)	--nP13[29]
74	2 13 13(10 14 14)	192.9070	51838.45	1.528E-06	(10, 2)	R2----[13]
75	2 13 14(10 14 15)	192.9095	51837.77	1.658E-06	(10, 2)	R1----[13]
76	2 27 28(11 30 29)	192.9095	51837.77	0.000E+00	(11, 2)	tr31--[27]
77	3 23 22(19 22 22)	192.9106	51837.48	1.617E-13	(19, 3)	--pQ23-[23]
78	3 11 11(15 12 11)	192.9110	51837.38	1.515E-11	(15, 3)	--rQ32-[11]
79	2 13 13(10 14 13)	192.9125	51836.97	7.835E-09	(10, 2)	--rQ32-[13]
80	3 11 12(15 12 13)	192.9162	51835.98	2.380E-09	(15, 3)	R1----[11]
81	3 23 23(19 22 22)	192.9173	51835.68	8.462E-11	(19, 3)	----P2[23]
82	0 11 10(4 8 9)	192.9186	51835.33	0.000E+00	(4, 0)	--nP13[11]
83	3 19 20(17 18 19)	192.9231	51834.12	4.280E-10	(17, 3)	----P1[19]
84	3 19 18(17 18 19)	192.9242	51833.82	7.804E-16	(17, 3)	pr13--[19]
85	0 15 16(4 16 16)	192.9279	51832.82	4.158E-06	(4, 0)	--rQ21-[15]
86	3 19 19(17 18 19)	192.9311	51831.98	1.116E-12	(17, 3)	--pQ12-[19]
87	3 17 18(16 18 18)	192.9317	51831.82	2.540E-12	(16, 3)	--rQ21-[17]
88	0 15 16(4 16 15)	192.9329	51831.50	4.065E-09	(4, 0)	--rP31[15]
89	0 15 14(4 16 15)	192.9337	51831.27	9.948E-04	(4, 0)	R3----[15]
90	0 15 15(4 16 16)	192.9358	51830.72	1.050E-03	(4, 0)	R2----[15]
91	0 15 16(4 16 17)	192.9359	51830.69	1.129E-03	(4, 0)	R1----[15]
92	3 17 18(16 18 17)	192.9361	51830.63	1.961E-15	(16, 3)	--rP31[17]
93	3 17 16(16 18 17)	192.9371	51830.37	7.749E-10	(16, 3)	R3----[17]
94	0 29 28(5 26 27)	192.9391	51829.84	0.000E+00	(5, 0)	--nP13[29]
95	3 17 17(16 18 18)	192.9396	51829.70	8.120E-17	(16, 3)	R2----[17]
96	0 15 15(4 16 15)	192.9407	51829.39	4.116E-06	(4, 0)	--rQ32-[15]

97	0 13 12)	(4 12 12)	192.9438	51828.57	7.619E-06	(4, 0)	--pQ23-[13]
98	3 17 17)	(16 18 17)	192.9440	51828.51	2.514E-12	(16, 3)	--rQ32-[17]
99	0 13 12)	(4 12 11)	192.9491	51827.14	1.185E-03	(4, 0)	---P3[13]
100	0 13 14)	(4 12 13)	192.9507	51826.71	1.384E-03	(4, 0)	---P1[13]
101	0 13 13)	(4 12 12)	192.9508	51826.67	1.268E-03	(4, 0)	---P2[13]
102	0 13 12)	(4 12 13)	192.9514	51826.53	1.129E-08	(4, 0)	pr13---[13]
103	3 23 24)	(18 26 25)	192.9523	51826.29	0.000E+00	(18, 3)	tr31---[23]
104	3 17 18)	(16 18 19)	192.9564	51825.17	8.672E-10	(16, 3)	R1---[17]
105	0 13 13)	(4 12 13)	192.9585	51824.63	7.549E-06	(4, 0)	--pQ12-[13]
106	3 23 24)	(19 22 23)	192.9601	51824.19	8.929E-11	(19, 3)	---P1[23]
107	3 23 22)	(19 22 23)	192.9615	51823.82	7.641E-17	(19, 3)	pr13---[23]
108	2 23 22)	(11 20 21)	192.9620	51823.67	0.000E+00	(11, 2)	--nP13[23]
109	3 21 20)	(18 18 19)	192.9679	51822.10	0.000E+00	(18, 3)	--nP13[21]
110	2 11 10)	(10 8 9)	192.9679	51822.09	0.000E+00	(10, 2)	--nP13[11]
111	3 23 23)	(19 22 23)	192.9682	51822.02	1.602E-13	(19, 3)	--pQ12-[23]
112	3 11 10)	(15 10 10)	192.9723	51820.91	1.668E-11	(15, 3)	--pQ23-[11]
113	3 13 14)	(15 16 15)	192.9775	51819.51	0.000E+00	(15, 3)	tr31---[13]
114	3 11 10)	(15 10 9)	192.9781	51819.34	1.826E-09	(15, 3)	---P3[11]
115	3 11 11)	(15 10 10)	192.9795	51818.98	1.983E-09	(15, 3)	---P2[11]
116	3 25 26)	(20 26 25)	192.9798	51818.90	1.723E-17	(20, 3)	--rP31[25]
117	3 25 24)	(20 26 25)	192.9813	51818.50	3.020E-11	(20, 3)	R3---[25]
118	3 21 22)	(17 24 23)	192.9850	51817.49	0.000E+00	(17, 3)	tr31---[21]
119	3 25 25)	(20 26 25)	192.9879	51816.71	4.610E-14	(20, 3)	--rQ32-[25]
120	3 11 12)	(15 10 11)	192.9902	51816.09	2.195E-09	(15, 3)	---P1[11]
121	3 11 10)	(15 10 11)	192.9908	51815.95	3.453E-14	(15, 3)	pr13---[11]
122	3 25 26)	(20 26 26)	192.9958	51814.59	4.658E-14	(20, 3)	--rQ21-[25]
123	3 11 11)	(15 10 11)	192.9980	51814.02	1.652E-11	(15, 3)	--pQ12-[11]
124	1 17 16)	(7 14 15)	193.0036	51812.51	0.000E+00	(7, 1)	--nP13[17]
125	3 25 25)	(20 26 26)	193.0040	51812.40	3.111E-11	(20, 3)	R2---[25]
126	3 19 18)	(17 16 17)	193.0066	51811.70	0.000E+00	(17, 3)	--nP13[19]
127	2 13 12)	(10 12 12)	193.0252	51806.71	8.510E-09	(10, 2)	--pQ23-[13]
128	0 19 20)	(4 22 21)	193.0252	51806.71	0.000E+00	(4, 0)	tr31---[19]
129	1 23 24)	(7 26 25)	193.0273	51806.15	0.000E+00	(7, 1)	tr31---[23]
130	3 17 16)	(16 16 16)	193.0304	51805.32	2.684E-12	(16, 3)	--pQ23-[17]
131	2 13 12)	(10 12 11)	193.0310	51805.16	1.323E-06	(10, 2)	---P3[13]
132	2 13 13)	(10 12 12)	193.0322	51804.82	1.417E-06	(10, 2)	---P2[13]
133	3 17 16)	(16 16 15)	193.0344	51804.24	7.288E-10	(16, 3)	---P3[17]
134	2 13 14)	(10 12 13)	193.0345	51804.22	1.546E-06	(10, 2)	---P1[13]
135	2 13 12)	(10 12 13)	193.0351	51804.04	1.261E-11	(10, 2)	pr13---[13]
136	3 17 17)	(16 16 16)	193.0373	51803.46	7.662E-10	(16, 3)	---P2[17]
137	2 13 13)	(10 12 13)	193.0422	51802.14	8.433E-09	(10, 2)	--pQ12-[13]
138	1 19 18)	(7 18 18)	193.0436	51801.76	1.404E-07	(7, 1)	--pQ23-[19]
139	1 19 18)	(7 18 17)	193.0489	51800.34	4.794E-05	(7, 1)	---P3[19]
140	1 19 19)	(7 18 18)	193.0505	51799.92	5.009E-05	(7, 1)	---P2[19]
141	1 19 20)	(7 18 19)	193.0508	51799.83	5.335E-05	(7, 1)	---P1[19]
142	3 25 26)	(20 26 27)	193.0517	51799.59	3.267E-11	(20, 3)	R1---[25]
143	1 21 22)	(7 22 22)	193.0518	51799.57	6.952E-08	(7, 1)	--rQ21-[21]
144	1 19 18)	(7 18 19)	193.0519	51799.53	9.728E-11	(7, 1)	pr13---[19]
145	3 11 10)	(15 8 9)	193.0521	51799.49	0.000E+00	(15, 3)	--nP13[11]
146	3 25 26)	(19 28 27)	193.0523	51799.44	0.000E+00	(19, 3)	tr31---[25]
147	3 17 18)	(16 16 17)	193.0550	51798.72	8.210E-10	(16, 3)	---P1[17]
148	3 17 16)	(16 16 17)	193.0559	51798.46	2.324E-15	(16, 3)	pr13---[17]
149	1 21 22)	(7 22 21)	193.0568	51798.23	3.592E-11	(7, 1)	--rP31[21]
150	1 21 20)	(7 22 21)	193.0581	51797.89	3.203E-05	(7, 1)	R3---[21]
151	2 15 16)	(10 16 16)	193.0587	51797.71	4.684E-09	(10, 2)	--rQ21-[15]
152	1 19 19)	(7 18 19)	193.0588	51797.69	1.391E-07	(7, 1)	--pQ12-[19]
153	1 21 21)	(7 22 22)	193.0598	51797.41	3.323E-05	(7, 1)	R2---[21]
154	3 23 22)	(19 20 21)	193.0598	51797.41	0.000E+00	(19, 3)	--nP13[23]
155	1 21 22)	(7 22 23)	193.0604	51797.26	3.514E-05	(7, 1)	R1---[21]
156	3 17 17)	(16 16 17)	193.0629	51796.60	2.660E-12	(16, 3)	--pQ12-[17]
157	2 15 16)	(10 16 15)	193.0639	51796.31	4.579E-12	(10, 2)	--rP31[15]
158	2 15 14)	(10 16 15)	193.0648	51796.09	1.121E-06	(10, 2)	R3---[15]
159	1 21 21)	(7 22 21)	193.0648	51796.07	6.880E-08	(7, 1)	--rQ32-[21]
160	2 15 15)	(10 16 16)	193.0666	51795.61	1.183E-06	(10, 2)	R2---[15]
161	2 17 18)	(10 20 19)	193.0675	51795.35	0.000E+00	(10, 2)	tr31---[17]
162	2 25 24)	(11 24 24)	193.0692	51794.89	2.161E-10	(11, 2)	--pQ23-[25]
163	2 15 16)	(10 16 17)	193.0693	51794.88	1.272E-06	(10, 2)	R1---[15]
164	3 23 24)	(18 24 23)	193.0696	51794.80	9.254E-17	(18, 3)	--rP31[23]
165	3 13 14)	(15 14 14)	193.0701	51794.66	9.391E-12	(15, 3)	--rQ21-[13]
166	3 23 22)	(18 24 23)	193.0710	51794.43	1.173E-10	(18, 3)	R3---[23]
167	2 15 15)	(10 16 15)	193.0718	51794.21	4.637E-09	(10, 2)	--rQ32-[15]
168	2 25 24)	(11 24 23)	193.0738	51793.67	1.296E-07	(11, 2)	---P3[25]
169	3 13 14)	(15 14 13)	193.0758	51793.13	1.199E-14	(15, 3)	--rP31[13]
170	2 25 25)	(11 24 24)	193.0759	51793.11	1.337E-07	(11, 2)	---P2[25]
171	3 13 12)	(15 14 13)	193.0765	51792.95	1.703E-09	(15, 3)	R3---[13]
172	3 23 23)	(18 24 23)	193.0777	51792.63	2.109E-13	(18, 3)	--rQ32-[23]
173	3 13 13)	(15 14 14)	193.0779	51792.57	1.813E-09	(15, 3)	R2---[13]
174	2 25 26)	(11 24 25)	193.0795	51792.14	1.407E-07	(11, 2)	---P1[25]
175	0 13 12)	(4 10 11)	193.0802	51791.96	0.000E+00	(4, 0)	--nP13[13]
176	2 25 24)	(11 24 25)	193.0810	51791.73	8.649E-14	(11, 2)	pr13---[25]
177	3 23 24)	(18 24 24)	193.0831	51791.16	2.131E-13	(18, 3)	--rQ21-[23]
178	3 13 13)	(15 14 13)	193.0836	51791.05	9.297E-12	(15, 3)	--rQ32-[13]
179	0 17 18)	(4 18 18)	193.0853	51790.58	2.343E-06	(4, 0)	--rQ21-[17]
180	2 25 25)	(11 24 25)	193.0877	51789.95	2.143E-10	(11, 2)	--pQ12-[25]
181	3 13 14)	(15 14 15)	193.0883	51789.78	1.967E-09	(15, 3)	R1---[13]
182	0 17 18)	(4 18 17)	193.0901	51789.30	1.809E-09	(4, 0)	--rP31[17]
183	0 17 16)	(4 18 17)	193.0910	51789.04	7.149E-04	(4, 0)	R3---[17]
184	3 23 23)	(18 24 24)	193.0913	51788.98	1.213E-10	(18, 3)	R2---[23]
185	0 17 17)	(4 18 18)	193.0932	51788.46	7.492E-04	(4, 0)	R2---[17]
186	0 17 18)	(4 18 19)	193.0934	51788.40	8.002E-04	(4, 0)	R1---[17]
187	3 19 20)	(16 22 21)	193.0955	51787.85	0.000E+00	(16, 3)	tr31---[19]
188	3 21 22)	(17 22 21)	193.0957	51787.80	2.915E-16	(17, 3)	--rP31[21]
189	3 21 20)	(17 22 21)	193.0969	51787.47	2.599E-10	(17, 3)	R3---[21]
190	0 17 17)	(4 18 17)	193.0980	51787.18	2.319E-06	(4, 0)	--rQ32-[17]
191	3 25 24)	(20 24 23)	193.0986	51787.00	2.897E-11	(20, 3)	---P3[25]
192	0 15 14)	(4 14 14)	193.1025	51785.98	4.427E-06	(4, 0)	--pQ23-[15]
193	3 21 21)	(17 22 21)	193.1037	51785.65	5.583E-13	(17, 3)	--rQ32-[21]
194	3 21 22)	(17 22 22)	193.1068	51784.82	5.641E-13	(17, 3)	--rQ21-[21]
195	0 15 14)	(4 14 13)	193.1076	51784.60	9.273E-04	(4, 0)	---P3[15]
196	0 15 16)	(4 14 15)	193.1094	51784.11	1.061E-03	(4, 0)	---P1[15]

197(0 15 15)(4 14 14) 193.1095 51784.10 9.827E-04 (4, 0) ----P2[15]
198(0 15 14)(4 14 15) 193.1102 51783.89 4.924E-09 (4, 0) PR13--[15]
199(3 25 24)(20 24 24) 193.1122 51783.36 4.832E-14 (20, 3) -PQ23-[25]
200(3 21 21)(17 22 22) 193.1148 51782.66 2.696E-10 (17, 3) R2----[21]
201(0 15 15)(4 14 15) 193.1172 51782.01 4.387E-06 (4, 0) -PQ12-[15]
202(3 25 25)(20 24 24) 193.1189 51781.57 2.989E-11 (20, 3) ----P2[25]
203(3 23 24)(18 24 25) 193.1366 51776.83 1.277E-10 (18, 3) R1----[23]
204(2 13 12)(10 10 11) 193.1418 51775.42 0.000E+00 (10, 2) --nP13[13]
205(3 17 16)(16 14 15) 193.1439 51774.88 0.000E+00 (16, 3) --nP13[17]
206(3 13 12)(15 12 12) 193.1574 51771.25 1.010E-11 (15, 3) -PQ23-[13]
207(3 21 22)(17 22 23) 193.1577 51771.16 2.851E-10 (17, 3) R1----[21]
208(2 27 28)(11 28 28) 193.1605 51770.43 9.489E-11 (11, 2) -rQ21-[27]
209(3 13 12)(15 12 11) 193.1630 51769.74 1.570E-09 (15, 3) ----P3[13]
210(3 25 26)(20 24 25) 193.1642 51769.44 3.144E-11 (20, 3) ----P1[25]
211(2 27 28)(11 28 27) 193.1645 51769.35 3.027E-14 (11, 2) --rP31[27]
212(3 13 13)(15 12 12) 193.1645 51769.35 1.681E-09 (15, 3) ----P2[13]
213(3 25 24)(20 24 25) 193.1657 51769.03 1.933E-17 (20, 3) PR13--[25]
214(2 27 26)(11 28 27) 193.1661 51768.91 7.154E-08 (11, 2) R3----[27]
215(3 15 16)(15 18 17) 193.1676 51768.52 0.000E+00 (15, 3) TR31--[15]
216(2 27 27)(11 28 28) 193.1687 51768.22 7.351E-08 (11, 2) R2----[27]
217(3 25 25)(20 24 25) 193.1723 51767.25 4.789E-14 (20, 3) -PQ12-[25]
218(2 27 27)(11 28 27) 193.1727 51767.14 9.389E-11 (11, 2) -rQ32-[27]
219(2 27 28)(11 28 29) 193.1728 51767.13 7.700E-08 (11, 2) R1----[27]
220(3 13 14)(15 12 13) 193.1752 51766.47 1.835E-09 (15, 3) ----P1[13]
221(3 25 26)(19 26 25) 193.1759 51766.30 2.761E-17 (19, 3) --rP31[25]
222(3 13 12)(15 12 13) 193.1759 51766.29 1.496E-14 (15, 3) PR13--[13]
223(3 25 24)(19 26 25) 193.1774 51765.89 4.837E-11 (19, 3) R3----[25]
224(3 23 22)(18 22 21) 193.1817 51764.75 1.121E-10 (18, 3) ----P3[23]
225(3 13 13)(15 12 13) 193.1830 51764.39 1.001E-11 (15, 3) -PQ12-[13]
226(3 25 25)(19 26 25) 193.1841 51764.11 7.384E-14 (19, 3) -rQ32-[25]
227(3 25 26)(19 26 26) 193.1920 51761.99 7.461E-14 (19, 3) -rQ21-[25]
228(3 23 22)(18 22 22) 193.1928 51761.76 2.219E-13 (18, 3) -PQ23-[23]
229(3 23 23)(18 22 22) 193.1995 51759.96 1.161E-10 (18, 3) ----P2[23]
230(0 21 22)(4 24 23) 193.2001 51759.82 0.000E+00 (4, 0) TR31--[21]
231(3 25 25)(19 26 26) 193.2001 51759.80 4.984E-11 (19, 3) R2----[25]
232(3 21 20)(17 20 19) 193.2003 51759.75 2.474E-10 (17, 3) ----P3[21]
233(2 15 14)(10 14 14) 193.2033 51758.96 4.988E-09 (10, 2) -PQ23-[15]
234(3 19 20)(16 20 20) 193.2059 51758.25 1.396E-12 (16, 3) -rQ21-[19]
235(2 15 14)(10 14 13) 193.2088 51757.48 1.045E-06 (10, 2) ----P3[15]
236(3 21 20)(17 20 20) 193.2090 51757.42 5.897E-13 (17, 3) -PQ23-[21]
237(2 15 15)(10 14 14) 193.2103 51757.08 1.107E-06 (10, 2) ----P2[15]
238(3 19 20)(16 20 19) 193.2113 51756.82 8.733E-16 (16, 3) --rP31[19]
239(3 19 18)(16 20 19) 193.2123 51756.53 5.292E-10 (16, 3) R3----[19]
240(2 15 16)(10 14 15) 193.2127 51756.42 1.196E-06 (10, 2) ----P1[15]
241(2 15 14)(10 14 15) 193.2136 51756.20 5.548E-12 (10, 2) PR13--[15]
242(3 19 19)(16 20 20) 193.2139 51756.11 5.515E-10 (16, 3) R2----[19]
243(3 21 21)(17 20 20) 193.2159 51755.59 2.572E-10 (17, 3) ----P2[21]
244(3 19 19)(16 20 19) 193.2192 51754.69 1.382E-12 (16, 3) -rQ32-[19]
245(2 15 15)(10 14 15) 193.2206 51754.32 4.942E-09 (10, 2) -PQ12-[15]
246(3 19 20)(16 20 21) 193.2294 51751.95 5.858E-10 (16, 3) R1----[19]
247(3 1 2)(14 4 3) 193.2330 51750.98 0.000E+00 (14, 3) TR31--[1]
248(1 19 18)(7 16 17) 193.2335 51750.87 0.000E+00 (7, 1) --nP13[19]
249(3 23 24)(18 22 23) 193.2424 51748.47 1.225E-10 (18, 3) ----P1[23]
250(2 17 18)(10 18 18) 193.2430 51748.33 2.666E-09 (10, 2) -rQ21-[17]
251(3 23 22)(18 22 23) 193.2438 51748.10 1.049E-16 (18, 3) PR13--[23]
252(3 3 4)(14 6 5) 193.2451 51747.76 0.000E+00 (14, 3) TR31--[3]
253(2 17 18)(10 18 17) 193.2479 51747.01 2.058E-12 (10, 2) --rP31[17]
254(3 25 26)(19 26 27) 193.2480 51746.99 5.233E-11 (19, 3) R1----[25]
255(2 17 16)(10 18 17) 193.2489 51746.75 8.133E-07 (10, 2) R3----[17]
256(3 13 12)(15 10 11) 193.2502 51746.39 0.000E+00 (15, 3) --nP13[13]
257(3 23 23)(18 22 23) 193.2505 51746.30 2.199E-13 (18, 3) -PQ12-[23]
258(2 17 17)(10 18 18) 193.2509 51746.21 8.523E-07 (10, 2) R2----[17]
259(3 1 2)(14 2 2) 193.2517 51745.99 2.653E-10 (14, 3) -rQ21-[1]
260(2 17 18)(10 18 19) 193.2538 51745.42 9.103E-07 (10, 2) R1----[17]
261(3 1 0)(14 2 1) 193.2539 51745.41 3.553E-10 (14, 3) R3----[1]
262(2 17 17)(10 18 17) 193.2558 51744.89 2.639E-09 (10, 2) -rQ32-[17]
263(2 19 20)(10 22 21) 193.2558 51744.89 0.000E+00 (10, 2) TR31--[19]
264(3 21 22)(17 20 21) 193.2563 51744.75 2.725E-10 (17, 3) ----P1[21]
265(3 1 2)(14 2 1) 193.2572 51744.52 1.769E-11 (14, 3) --rP31[1]
266(3 21 20)(17 20 21) 193.2576 51744.42 3.344E-16 (17, 3) PR13--[21]
267(3 1 1)(14 2 2) 193.2587 51744.10 7.888E-10 (14, 3) R2----[1]
268(0 15 14)(4 12 13) 193.2617 51743.32 0.000E+00 (4, 0) --nP13[15]
269(0 19 20)(4 20 20) 193.2618 51743.28 1.268E-06 (4, 0) -rQ21-[19]
270(1 25 26)(7 28 27) 193.2625 51743.10 0.000E+00 (7, 1) TR31--[25]
271(3 1 1)(14 2 1) 193.2642 51742.63 2.629E-10 (14, 3) -rQ32-[1]
272(3 21 21)(17 20 21) 193.2644 51742.59 5.844E-13 (17, 3) -PQ12-[21]
273(3 1 2)(14 2 3) 193.2657 51742.24 1.486E-09 (14, 3) R1----[1]
274(0 19 20)(4 20 19) 193.2664 51742.05 7.928E-10 (4, 0) --rP31[19]
275(0 19 18)(4 20 19) 193.2675 51741.75 4.804E-04 (4, 0) R3----[19]
276(0 19 19)(4 20 20) 193.2698 51741.14 5.006E-04 (4, 0) R2----[19]
277(0 19 20)(4 20 21) 193.2701 51741.05 5.318E-04 (4, 0) R1----[19]
278(3 15 16)(15 16 16) 193.2715 51740.70 5.581E-12 (15, 3) -rQ21-[15]
279(3 25 24)(20 22 23) 193.2715 51740.68 0.000E+00 (20, 3) --nP13[25]
280(3 27 28)(20 30 29) 193.2741 51739.98 0.000E+00 (20, 3) TR31--[27]
281(3 1 0)(14 0 1) 193.2743 51739.93 1.776E-10 (14, 3) PR13--[1]
282(0 19 19)(4 20 19) 193.2744 51739.91 1.255E-06 (4, 0) -rQ32-[19]
283(1 21 20)(7 20 20) 193.2755 51739.63 7.262E-08 (7, 1) -PQ23-[21]
284(3 15 16)(15 16 15) 193.2775 51739.07 5.455E-15 (15, 3) --rP31[15]
285(3 1 2)(14 0 1) 193.2776 51739.05 8.843E-10 (14, 3) ----P1[1]
286(3 3 4)(14 4 4) 193.2781 51738.91 1.241E-10 (14, 3) -rQ21-[3]
287(3 15 14)(15 16 15) 193.2784 51738.85 1.335E-09 (15, 3) R3----[15]
288(3 15 15)(15 16 16) 193.2793 51738.60 1.409E-09 (15, 3) R2----[15]
289(1 21 20)(7 20 19) 193.2806 51738.25 3.046E-05 (7, 1) ----P3[21]
290(1 21 21)(7 20 20) 193.2822 51737.81 3.168E-05 (7, 1) ----P2[21]
291(0 17 16)(4 16 16) 193.2827 51737.70 2.475E-06 (4, 0) -PQ23-[17]
292(1 21 22)(7 20 21) 193.2827 51737.70 3.357E-05 (7, 1) ----P1[21]
293(1 21 20)(7 20 21) 193.2839 51737.36 4.119E-11 (7, 1) PR13--[21]
294(3 5 6)(14 8 7) 193.2843 51737.27 0.000E+00 (14, 3) TR31--[5]
295(3 3 2)(14 4 3) 193.2843 51737.27 1.419E-09 (14, 3) R3----[3]
296(3 1 1)(14 0 1) 193.2847 51737.16 5.258E-10 (14, 3) -PQ12-[1]

297(3 3 4)(14 4 3) 193.2847 51737.14 1.970E-12 (14, 3) --rP31[3]
298(1 23 24)(7 24 24) 193.2851 51737.05 3.453E-08 (7, 1) -rQ21-[23]
299(3 15 15)(15 16 15) 193.2854 51736.97 5.525E-12 (15, 3) -rQ32-[15]
300(3 3 3)(14 4 4) 193.2855 51736.95 1.844E-09 (14, 3) R2----[3]
301(2 25 24)(11 22 23) 193.2860 51736.80 0.000E+00 (11, 2) --nP13[25]
302(0 17 16)(4 16 15) 193.2876 51736.37 6.720E-04 (4, 0) ----P3[17]
303(3 15 16)(15 16 17) 193.2890 51736.01 1.515E-09 (15, 3) R1----[15]
304(0 17 17)(4 16 16) 193.2896 51735.84 7.066E-04 (4, 0) ----P2[17]
305(0 17 18)(4 16 17) 193.2897 51735.82 7.572E-04 (4, 0) ----P1[17]
306(1 23 24)(7 24 23) 193.2899 51735.75 1.499E-11 (7, 1) --rP31[23]
307(0 17 16)(4 16 17) 193.2906 51735.56 2.143E-09 (4, 0) PR13--[17]
308(1 21 21)(7 20 21) 193.2907 51735.54 7.199E-08 (7, 1) -PQ12-[21]
309(1 23 22)(7 24 23) 193.2913 51735.38 1.901E-05 (7, 1) R3----[23]
310(3 3 3)(14 4 3) 193.2920 51735.19 1.230E-10 (14, 3) -rQ32-[3]
311(3 3 4)(14 4 5) 193.2922 51735.15 2.427E-09 (14, 3) R1----[3]
312(1 23 23)(7 24 24) 193.2932 51734.88 1.965E-05 (7, 1) R2----[23]
313(1 23 24)(7 24 25) 193.2939 51734.70 2.070E-05 (7, 1) R1----[23]
314(3 25 24)(19 24 23) 193.2950 51734.40 4.641E-11 (19, 3) ----P3[25]
315(0 17 17)(4 16 17) 193.2976 51733.70 2.453E-06 (4, 0) -PQ12-[17]
316(1 23 23)(7 24 23) 193.2981 51733.57 3.417E-08 (7, 1) -rQ32-[23]
317(3 3 2)(14 2 2) 193.3029 51732.27 1.656E-10 (14, 3) -PQ23-[3]
318(3 3 2)(14 2 1) 193.3084 51730.80 8.941E-10 (14, 3) ----P3[3]
319(3 25 24)(19 24 24) 193.3086 51730.76 7.740E-14 (19, 3) -PQ23-[25]
320(3 3 3)(14 2 2) 193.3107 51730.20 1.311E-09 (14, 3) ----P2[3]
321(3 19 18)(16 18 18) 193.3149 51729.07 1.467E-12 (16, 3) -PQ23-[19]
322(3 25 25)(19 24 24) 193.3153 51728.97 4.789E-11 (19, 3) ----P2[25]
323(3 3 2)(14 2 3) 193.3170 51728.52 4.730E-12 (14, 3) PR13--[3]
324(3 3 4)(14 2 3) 193.3174 51728.40 1.915E-09 (14, 3) ----P1[3]
325(3 19 18)(16 18 17) 193.3194 51727.88 5.010E-10 (16, 3) ----P3[19]
326(3 19 19)(16 18 18) 193.3218 51727.23 5.235E-10 (16, 3) ----P2[19]
327(3 3 3)(14 2 3) 193.3247 51726.45 1.639E-10 (14, 3) -PQ12-[3]
328(3 3 2)(14 0 1) 193.3289 51725.33 0.000E+00 (14, 3) --nP13[3]
329(3 5 6)(14 6 6) 193.3319 51724.52 7.338E-11 (14, 3) -rQ21-[5]
330(3 23 24)(17 26 25) 193.3328 51724.28 0.000E+00 (17, 3) TR31--[23]
331(3 25 26)(18 28 27) 193.3349 51723.72 0.000E+00 (18, 3) TR31--[25]
332(3 5 4)(14 6 5) 193.3384 51722.78 2.162E-09 (14, 3) R3----[5]
333(3 5 6)(14 6 5) 193.3385 51722.76 5.131E-13 (14, 3) --rP31[5]
334(3 19 20)(16 18 19) 193.3387 51722.71 5.575E-10 (16, 3) ----P1[19]
335(2 15 14)(10 12 13) 193.3389 51722.65 0.000E+00 (10, 2) --nP13[15]
336(3 5 5)(14 6 6) 193.3394 51722.52 2.544E-09 (14, 3) R2----[5]
337(3 19 18)(16 18 19) 193.3398 51722.42 1.016E-15 (16, 3) PR13--[19]
338(3 23 22)(18 20 21) 193.3425 51721.69 0.000E+00 (18, 3) --nP13[23]
339(3 5 5)(14 6 5) 193.3459 51720.77 7.268E-11 (14, 3) -rQ32-[5]
340(3 5 6)(14 6 7) 193.3463 51720.68 3.048E-09 (14, 3) R1----[5]
341(3 19 19)(16 18 19) 193.3466 51720.58 1.454E-12 (16, 3) -PQ12-[19]
342(3 21 20)(17 18 19) 193.3485 51720.09 0.000E+00 (17, 3) --nP13[21]
343(3 7 8)(14 10 9) 193.3509 51719.45 0.000E+00 (14, 3) TR31--[7]
344(3 25 26)(19 24 25) 193.3606 51716.84 5.036E-11 (19, 3) ----P1[25]
345(3 25 24)(19 24 25) 193.3622 51716.43 3.096E-17 (19, 3) PR13--[25]
346(3 25 25)(19 24 25) 193.3688 51714.64 7.672E-14 (19, 3) -PQ12-[25]
347(3 15 14)(15 14 14) 193.3713 51713.99 5.944E-12 (15, 3) -PQ23-[15]
348(3 5 4)(14 4 4) 193.3715 51713.93 8.805E-11 (14, 3) -PQ23-[5]
349(3 15 14)(15 14 13) 193.3770 51712.47 1.245E-09 (15, 3) ----P3[15]
350(3 5 4)(14 4 3) 193.3781 51712.16 1.712E-09 (14, 3) ----P3[5]
351(3 15 15)(15 14 14) 193.3783 51712.12 1.319E-09 (15, 3) ----P2[15]
352(3 5 5)(14 4 4) 193.3790 51711.92 2.093E-09 (14, 3) ----P2[5]
353(3 5 4)(14 4 5) 193.3855 51710.17 8.893E-13 (14, 3) PR13--[5]
354(3 5 6)(14 4 5) 193.3856 51710.16 2.601E-09 (14, 3) ----P1[5]
355(3 15 16)(15 14 15) 193.3887 51709.34 1.425E-09 (15, 3) ----P1[15]
356(3 17 18)(15 20 19) 193.3893 51709.18 0.000E+00 (15, 3) TR31--[17]
357(3 15 14)(15 14 15) 193.3895 51709.11 6.611E-15 (15, 3) PR13--[15]
358(3 5 5)(14 4 5) 193.3931 51708.16 8.719E-11 (14, 3) -PQ12-[5]
359(0 23 24)(4 26 25) 193.3955 51707.52 0.000E+00 (4, 0) TR31--[23]
360(3 21 22)(16 24 23) 193.3959 51707.41 0.000E+00 (16, 3) TR31--[21]
361(3 15 15)(15 14 15) 193.3965 51707.23 5.889E-12 (15, 3) -PQ12-[15]
362(2 27 26)(11 26 26) 193.4010 51706.04 9.808E-11 (11, 2) -PQ23-[27]
363(3 27 28)(20 28 27) 193.4035 51705.37 6.814E-18 (20, 3) --rP31[27]
364(3 27 26)(20 28 27) 193.4052 51704.93 1.610E-11 (20, 3) R3----[27]
365(2 27 26)(11 26 25) 193.4053 51704.89 6.880E-08 (11, 2) ----P3[27]
366(2 17 16)(10 16 16) 193.4062 51704.66 2.816E-09 (10, 2) -PQ23-[17]
367(2 27 27)(11 26 26) 193.4076 51704.27 7.079E-08 (11, 2) ----P2[27]
368(3 5 4)(14 2 3) 193.4108 51703.42 0.000E+00 (14, 3) --nP13[5]
369(2 27 28)(11 26 27) 193.4114 51703.25 7.425E-08 (11, 2) ----P1[27]
370(2 17 16)(10 16 15) 193.4114 51703.25 7.646E-07 (10, 2) ----P3[17]
371(3 27 27)(20 28 27) 193.4118 51703.16 2.114E-14 (20, 3) -rQ32-[27]
372(3 7 8)(14 8 8) 193.4131 51702.81 4.626E-11 (14, 3) -rQ21-[7]
373(2 27 26)(11 26 27) 193.4131 51702.80 3.364E-14 (11, 2) PR13--[27]
374(2 17 17)(10 16 16) 193.4131 51702.80 8.039E-07 (10, 2) ----P2[17]
375(2 17 18)(10 16 17) 193.4158 51702.08 8.615E-07 (10, 2) ----P1[17]
376(2 17 16)(10 16 17) 193.4168 51701.82 2.438E-12 (10, 2) PR13--[17]
377(3 7 8)(14 8 7) 193.4193 51701.14 1.814E-13 (14, 3) --rP31[7]
378(3 7 6)(14 8 7) 193.4195 51701.09 2.565E-09 (14, 3) R3----[7]
379(2 27 27)(11 26 27) 193.4197 51701.04 9.724E-11 (11, 2) -PQ12-[27]
380(3 7 7)(14 8 8) 193.4206 51700.80 2.886E-09 (14, 3) R2----[7]
381(3 27 28)(20 28 28) 193.4221 51700.39 2.136E-14 (20, 3) -rQ21-[27]
382(2 17 17)(10 16 17) 193.4237 51699.96 2.791E-09 (10, 2) -PQ12-[17]
383(3 7 7)(14 8

397(3 25 24)(18 26 25) 193.4603 51690.18 6.638E-11 (18, 3) R3----[25]
398(2 19 20)(10 20 21) 193.4610 51690.00 6.117E-07 (10, 2) R1----[19]
399(2 19 19)(10 20 19) 193.4625 51689.61 1.443E-09 (10, 2) -rQ32-[19]
400(0 21 22)(4 22 21) 193.4642 51689.16 3.386E-10 (4, 0) -rP31-[21]
401(3 23 24)(17 24 24) 193.4642 51689.14 2.838E-13 (17, 3) -rQ21-[23]
402(0 17 16)(4 14 15) 193.4648 51688.98 0.000E+00 (4, 0) -nP13-[17]
403(0 21 20)(4 22 21) 193.4654 51688.83 3.019E-04 (4, 0) R3----[21]
404(3 25 25)(18 26 25) 193.4670 51688.39 1.013E-13 (18, 3) -rQ32-[25]
405(3 7 6)(14 6 6) 193.4672 51688.34 5.284E-11 (14, 3) -pQ23-[7]
406(0 21 21)(4 22 22) 193.4678 51688.20 3.132E-04 (4, 0) R2----[21]
407(3 25 24)(19 22 23) 193.4682 51688.07 0.000E+00 (19, 3) -nP13-[25]
408(0 21 22)(4 22 23) 193.4682 51688.07 3.312E-04 (4, 0) R1----[21]
409(2 21 22)(10 24 23) 193.4691 51687.84 0.000E+00 (10, 2) tR31--[21]
410(3 27 28)(19 30 29) 193.4708 51687.38 0.000E+00 (19, 3) tR31--[27]
411(0 21 21)(4 22 21) 193.4722 51687.01 6.484E-07 (4, 0) -rQ32-[21]
412(3 23 23)(17 24 24) 193.4724 51686.97 1.615E-10 (17, 3) R2----[23]
413(3 7 6)(14 6 5) 193.4738 51686.58 2.191E-09 (14, 3) ----P3[7]
414(3 7 7)(14 6 6) 193.4746 51686.37 2.512E-09 (14, 3) ----P2[7]
415(3 25 26)(18 26 26) 193.4750 51686.27 1.024E-13 (18, 3) -rQ21-[25]
416(3 15 14)(15 12 13) 193.4767 51685.80 0.000E+00 (15, 3) -nP13-[15]
417(3 27 28)(20 28 29) 193.4808 51684.71 1.733E-11 (20, 3) R1----[27]
418(3 7 8)(14 6 7) 193.4815 51684.54 2.935E-09 (14, 3) ----P1[7]
419(3 7 6)(14 6 7) 193.4816 51684.50 2.710E-13 (14, 3) pR13--[7]
420(0 19 18)(4 18 18) 193.4821 51684.36 1.331E-06 (4, 0) -pQ23-[19]
421(3 25 25)(18 26 26) 193.4832 51684.08 6.839E-11 (18, 3) R2----[25]
422(1 21 20)(7 18 19) 193.4864 51683.23 0.000E+00 (7, 1) -nP13-[21]
423(0 19 18)(4 18 17) 193.4870 51683.07 4.545E-04 (4, 0) ----P3[19]
424(3 7 7)(14 6 7) 193.4890 51682.53 5.234E-11 (14, 3) -pQ12-[7]
425(0 19 19)(4 18 18) 193.4890 51682.52 4.749E-04 (4, 0) ----P2[19]
426(0 19 20)(4 18 19) 193.4892 51682.47 5.058E-04 (4, 0) ----P1[19]
427(0 19 18)(4 18 19) 193.4903 51682.18 9.224E-10 (4, 0) pR13--[19]
428(0 19 19)(4 18 19) 193.4972 51680.34 1.319E-06 (4, 0) -pQ12-[19]
429(2 29 30)(11 30 30) 193.5009 51679.36 4.116E-11 (11, 2) -rQ21-[29]
430(3 17 18)(15 18 18) 193.5037 51678.60 3.191E-12 (15, 3) -rQ21-[17]
431(2 29 30)(11 30 29) 193.5046 51678.36 1.144E-14 (11, 2) -rP31-[29]
432(2 29 28)(11 30 29) 193.5064 51677.88 3.570E-08 (11, 2) R3----[29]
433(2 29 29)(11 30 30) 193.5092 51677.13 3.661E-08 (11, 2) R2----[29]
434(3 17 18)(15 18 17) 193.5106 51676.75 2.464E-15 (15, 3) -rP31-[17]
435(3 17 16)(15 18 17) 193.5116 51676.49 9.735E-10 (15, 3) R3----[17]
436(3 17 17)(15 18 18) 193.5116 51676.48 1.020E-09 (15, 3) R2----[17]
437(2 29 29)(11 30 29) 193.5130 51676.13 4.072E-11 (11, 2) -rQ32-[29]
438(2 29 30)(11 30 31) 193.5135 51675.98 3.825E-08 (11, 2) R1----[29]
439(3 21 22)(16 22 22) 193.5136 51675.95 7.347E-13 (16, 3) -rQ21-[21]
440(3 23 24)(17 24 25) 193.5179 51674.82 1.701E-10 (17, 3) R1----[23]
441(3 17 17)(15 18 17) 193.5186 51674.63 3.158E-12 (15, 3) -rQ32-[17]
442(3 17 18)(15 18 19) 193.5201 51674.23 1.090E-09 (15, 3) R1----[17]
443(3 21 22)(16 22 21) 193.5204 51674.15 3.797E-16 (16, 3) -rP31-[21]
444(1 27 28)(7 30 29) 193.5205 51674.11 0.000E+00 (7, 1) tR31--[27]
445(3 7 6)(14 4 5) 193.5210 51673.98 0.000E+00 (14, 3) -nP13[7]
446(3 21 20)(16 22 21) 193.5216 51673.82 3.385E-10 (16, 3) R3----[21]
447(3 21 21)(16 22 22) 193.5217 51673.80 3.512E-10 (16, 3) R2----[21]
448(3 9 10)(14 10 10) 193.5217 51673.78 2.949E-11 (14, 3) -rQ21-[9]
449(3 9 10)(14 10 9) 193.5277 51672.19 7.390E-14 (14, 3) -rP31[9]
450(3 9 8)(14 10 9) 193.5281 51672.09 2.637E-09 (14, 3) R3----[9]
451(3 21 21)(16 22 21) 193.5285 51671.99 7.271E-13 (16, 3) -rQ32-[21]
452(3 27 26)(20 26 25) 193.5292 51671.79 1.550E-11 (20, 3) ----P3[27]
453(3 9 9)(14 10 10) 193.5294 51671.73 2.891E-09 (14, 3) R2----[9]
454(1 23 22)(7 22 22) 193.5296 51671.68 3.592E-08 (7, 1) -pQ23-[23]
455(3 25 26)(18 26 27) 193.5311 51671.27 7.181E-11 (18, 3) R1----[25]
456(1 23 22)(7 22 21) 193.5346 51670.34 1.816E-05 (7, 1) ----P3[23]
457(3 21 22)(16 22 23) 193.5352 51670.18 3.714E-10 (16, 3) R1----[21]
458(3 9 9)(14 10 9) 193.5354 51670.14 2.920E-11 (14, 3) -rQ32-[9]
459(1 23 23)(7 22 22) 193.5364 51669.88 1.880E-05 (7, 1) ----P2[23]
460(3 9 10)(14 10 11) 193.5367 51669.78 3.229E-09 (14, 3) R1----[9]
461(1 23 24)(7 22 23) 193.5369 51669.74 1.984E-05 (7, 1) ----P1[23]
462(1 23 22)(7 22 23) 193.5383 51669.37 1.698E-11 (7, 1) pR13--[23]
463(1 25 26)(7 26 26) 193.5410 51668.64 1.636E-08 (7, 1) -rQ21-[25]
464(1 23 23)(7 22 23) 193.5450 51667.57 3.561E-08 (7, 1) -pQ12-[23]
465(3 27 26)(20 26 26) 193.5453 51667.48 2.209E-14 (20, 3) -pQ23-[27]
466(1 25 26)(7 26 25) 193.5457 51667.38 6.053E-12 (7, 1) -rP31-[25]
467(1 25 24)(7 26 25) 193.5473 51666.97 1.061E-05 (7, 1) R3----[25]
468(1 25 25)(7 26 26) 193.5492 51666.45 1.093E-05 (7, 1) R2----[25]
469(1 25 26)(7 26 27) 193.5499 51666.25 1.148E-05 (7, 1) R1----[25]
470(3 27 27)(20 26 26) 193.5520 51665.71 1.595E-11 (20, 3) ----P2[27]
471(1 25 25)(7 26 25) 193.5539 51665.19 1.619E-08 (7, 1) -rQ32-[25]
472(2 17 16)(10 14 15) 193.5608 51663.36 0.000E+00 (10, 2) -nP13-[17]
473(3 23 22)(17 22 21) 193.5631 51662.73 1.494E-10 (17, 3) ----P3[23]
474(3 11 12)(14 14 13) 193.5673 51661.63 0.000E+00 (14, 3) tR31--[11]
475(3 23 22)(17 22 22) 193.5743 51659.75 2.954E-13 (17, 3) -pQ23-[23]
476(3 25 24)(18 24 23) 193.5783 51658.68 6.369E-11 (18, 3) ----P3[25]
477(3 23 23)(17 22 22) 193.5811 51657.95 1.546E-10 (17, 3) ----P2[23]
478(3 9 8)(14 8 8) 193.5904 51655.45 3.273E-11 (14, 3) -pQ23-[9]
479(3 25 24)(18 24 24) 193.5919 51655.04 1.062E-13 (18, 3) -pQ23-[25]
480(3 9 8)(14 8 7) 193.5967 51653.78 2.339E-09 (14, 3) ----P3[9]
481(3 9 9)(14 8 8) 193.5977 51653.51 2.594E-09 (14, 3) ----P2[9]
482(3 25 25)(18 24 24) 193.5987 51653.25 6.572E-11 (18, 3) ----P2[25]
483(3 27 28)(20 26 27) 193.5999 51652.92 1.672E-11 (20, 3) ----P1[27]
484(3 27 28)(19 28 27) 193.6005 51652.77 1.091E-17 (19, 3) -rP31-[27]
485(3 27 26)(20 26 27) 193.6015 51652.48 7.576E-18 (20, 3) pR13--[27]
486(3 27 26)(19 28 27) 193.6021 51652.33 2.579E-11 (19, 3) R3----[27]
487(3 9 10)(14 8 9) 193.6048 51651.62 2.932E-09 (14, 3) ----P1[9]
488(3 9 8)(14 8 9) 193.6051 51651.52 1.013E-13 (14, 3) pR13--[9]
489(3 27 27)(20 26 27) 193.6082 51650.71 2.190E-14 (20, 3) -pQ12-[27]
490(3 27 27)(19 28 27) 193.6087 51650.56 3.385E-14 (19, 3) -rQ32-[27]
491(0 25 26)(4 28 27) 193.6115 51649.82 0.000E+00 (4, 0) tR31--[25]
492(3 9 9)(14 8 9) 193.6124 51649.58 3.243E-11 (14, 3) -pQ12-[9]
493(3 17 16)(15 16 16) 193.6158 51648.67 3.372E-12 (15, 3) -pQ23-[17]
494(3 27 28)(19 28 28) 193.6191 51647.79 3.421E-14 (19, 3) -rQ21-[27]
495(3 17 16)(15 16 15) 193.6219 51647.04 9.155E-10 (15, 3) ----P3[17]
496(3 17 17)(15 16 16) 193.6228 51646.81 9.626E-10 (15, 3) ----P2[17]

497(3 23 24)(17 22 23) 193.6241 51646.46 1.632E-10 (17, 3) ----P1[23]
498(3 23 22)(17 22 23) 193.6255 51646.09 1.397E-16 (17, 3) pR13--[23]
499(3 27 27)(19 28 28) 193.6274 51645.57 2.650E-11 (19, 3) R2----[27]
500(2 19 18)(10 18 18) 193.6317 51644.43 1.531E-09 (10, 2) -pQ23-[19]
501(3 23 23)(17 22 23) 193.6322 51644.29 2.928E-13 (17, 3) -pQ12-[23]
502(3 17 18)(15 16 17) 193.6324 51644.25 1.031E-09 (15, 3) ----P1[17]
503(3 21 20)(16 20 20) 193.6325 51644.21 7.680E-13 (16, 3) -pQ23-[21]
504(3 17 16)(15 16 17) 193.6334 51643.98 2.920E-15 (15, 3) pR13--[17]
505(2 27 26)(11 24 25) 193.6357 51643.38 0.000E+00 (11, 2) -nP13-[27]
506(2 19 18)(10 18 17) 193.6367 51643.10 5.229E-07 (10, 2) ----P3[19]
507(3 21 20)(16 20 19) 193.6379 51642.79 3.222E-10 (16, 3) ----P3[21]
508(2 19 19)(10 18 18) 193.6386 51642.59 5.464E-07 (10, 2) ----P2[19]
509(3 21 21)(16 20 20) 193.6394 51642.39 3.350E-10 (16, 3) ----P2[21]
510(3 17 17)(15 16 17) 193.6404 51642.13 3.342E-12 (15, 3) -pQ12-[17]
511(3 19 20)(15 22 21) 193.6408 51642.01 0.000E+00 (15, 3) tR31--[19]
512(2 19 20)(10 18 19) 193.6416 51641.81 5.819E-07 (10, 2) ----P1[19]
513(2 19 18)(10 18 19) 193.6427 51641.51 1.061E-12 (10, 2) pR13--[19]
514(3 25 26)(18 24 25) 193.6441 51641.12 6.911E-11 (18, 3) ----P1[25]
515(3 25 24)(18 24 25) 193.6457 51640.71 4.250E-17 (18, 3) pR13--[25]
516(2 19 19)(10 18 19) 193.6496 51639.67 1.518E-09 (10, 2) -pQ12-[19]
517(3 25 25)(18 24 25) 193.6523 51638.93 1.053E-13 (18, 3) -pQ12-[25]
518(3 21 22)(16 20 21) 193.6549 51638.25 3.550E-10 (16, 3) ----P1[21]
519(3 21 20)(16 20 21) 193.6561 51637.92 4.356E-16 (16, 3) pR13--[21]
520(3 11 12)(14 12 12) 193.6579 51637.45 1.857E-11 (14, 3) -rQ21-[11]
521(3 9 8)(14 6 7) 193.6589 51637.18 0.000E+00 (14, 3) -nP13[9]
522(3 21 21)(16 20 21) 193.6630 51636.09 7.612E-13 (16, 3) -pQ12-[21]
523(3 11 12)(14 12 11) 193.6636 51635.92 3.229E-14 (14, 3) -rP31[11]
524(3 11 10)(14 12 11) 193.6642 51635.78 2.439E-09 (14, 3) R3----[11]
525(3 11 11)(14 12 12) 193.6656 51635.39 2.629E-09 (14, 3) R2----[11]
526(3 11 11)(14 12 11) 193.6714 51633.86 1.838E-11 (14, 3) -rQ32-[11]
527(3 11 12)(14 12 13) 193.6730 51633.42 2.887E-09 (14, 3) R1----[11]
528(3 27 28)(19 28 29) 193.6779 51632.11 2.776E-11 (19, 3) R1----[27]
529(0 23 24)(4 24 24) 193.6783 51632.02 3.232E-07 (4, 0) -rQ21-[23]
530(2 21 22)(10 22 22) 193.6818 51631.08 7.628E-10 (10, 2) -rQ21-[21]
531(0 23 24)(4 24 23) 193.6825 51630.89 1.403E-10 (4, 0) -rP31-[23]
532(0 23 22)(4 24 23) 193.6839 51630.52 1.779E-04 (4, 0) R3----[23]
533(2 21 22)(10 22 21) 193.6861 51629.92 3.942E-13 (10, 2) -rP31[21]
534(0 23 23)(4 24 24) 193.6864 51629.85 1.839E-04 (4, 0) R2----[23]
535(0 23 24)(4 24 25) 193.6870 51629.70 1.938E-04 (4, 0) R1----[23]
536(2 21 20)(10 22 21) 193.6874 51629.59 3.514E-07 (10, 2) R3----[21]
537(0 19 18)(4 16 17) 193.6874 51629.59 0.000E+00 (4, 0) -nP13[19]
538(2 21 21)(10 22 22) 193.6898 51628.93 3.646E-07 (10, 2) R2----[21]
539(0 23 23)(4 24 23) 193.6907 51628.71 3.199E-07 (4, 0) -rQ32-[23]
540(2 21 22)(10 22 23) 193.6933 51628.01 3.856E-07 (10, 2) R1----[21]
541(2 21 21)(10 22 21) 193.6942 51627.76 7.549E-10 (10, 2) -rQ32-[21]
542(0 21 20)(4 20 20) 193.7031 51625.39 6.844E-07 (4, 0) -pQ23-[21]
543(2 23 24)(10 26 25) 193.7069 51624.38 0.000E+00 (10, 2) tR31--[23]
544(0 21 20)(4 20 19) 193.7077 51624.16 2.871E-04 (4, 0) ----P3[21]
545(0 21 21)(4 20 20) 193.7100 51623.57 2.985E-04 (4, 0) ----P2[21]
546(0 21 22)(4 20 21) 193.7102 51623.50 3.163E-04 (4, 0) ----P1[21]
547(0 21 20)(4 20 21) 193.7115 51623.16 3.882E-10 (4, 0) pR13--[21]
548(3 27 26)(20 24 25) 193.7146 51622.33 0.000E+00 (20, 3) -nP13[27]
549(3 25 26)(17 28 27) 193.7169 51621.71 0.000E+00 (17, 3) tR31--[25]
550(3 13 14)(14 16 15) 193.7180 51621.43 0.000E+00 (14, 3) tR31--[13]
551(0 21 21)(4 20 21) 193.7183 51621.34 6.784E-07 (4, 0) -pQ12-[21]
552(3 23 22)(17 20 21) 193.7246 51619.68 0.000E+00 (17, 3) -nP13[23]
553(3 27 26)(19 26 25) 193.7264 51619.19 2.482E-11 (19, 3) ----P3[27]
554(3 23 24)(16 26 25) 193.7307 51618.05 0.000E+00 (16, 3) tR31--[23]
555(3 17 16)(15 14 15) 193.7335 51617.31 0.000E+00 (15, 3) -nP13[17]
556(3 11 10)(14 10 10) 193.7409 51615.33 2.023E-11 (14, 3) -pQ23-[11]
557(3 27 26)(19 26 26) 193.7426 51614.88 3.538E-14 (19, 3) -pQ23-[27]
558(3 11 10)(14 10 9) 193.7469 51613.73 2.215E-09 (14, 3) ----P3[11]
559(3 11 11)(14 10 10) 193.7481 51613.41 2.405E-09 (14, 3) ----P2[11]
560(3 27 27)(19 26 26) 193.7492 51613.11 2.554E-11 (19, 3) ----P2[27]
561(3 25 24)(18 22 23) 193.7520 51612.36 0.000E+00 (18, 3) -nP13[25]
562(3 27 28)(18 30 29) 193.7547 51611.66 0.000E+00 (18, 3) tR31--[27]
563(3 11 12)(14 10 11) 193.7554 51611.47 2.662E-09 (14, 3) ----P1[11]
564(3 11 10)(14 10 11) 193.7559 51611.33 4.188E-14 (14, 3) pR13--[11]
565(2 29 28)(11 28 28) 193.7589 51610.53 4.242E-11 (11, 2) -pQ23-[29]
566(1 23 22)(7 20 21) 193.7616 51609.81 0.000E+00 (7, 1) -nP13[25]
567(2 29 28)(11 28 27) 193.7629 51609.46 3.443E-08 (11, 2) ----P3[29]
568(3 11 11)(14 10 11) 193.7631 51609.41 2.004E-11 (14, 3) -pQ12-[11]
569(3 19 20)(15 20 20) 193.7650 51608.91 1.754E-12 (15, 3) -rQ21-[19]
570(2 29 29)(11 28 28) 193.7655 51608.78 3.534E-08 (11, 2) ----P2[29]
571(3 21 20)(16 18 19) 193.7659 51608.68 0.000E+00 (16, 3) -nP13[21]
572(2 29 30)(11 28 29) 193.7695 51607.71 3.697E-08 (11, 2) ----P1[29]
573(2 29 28)(11 28 29) 193.7713 51607.23 1.261E-14 (11, 2) pR13--[29]
574(3 19 19)(15 20 20) 193.7730 51606.77 6.929E-10 (15, 3) R2----[19]
575(3 19 20)(15 20 19) 193.7732 51606.73 1.097E-15 (15, 3) -rP31[19]
576(3 19 18)(15 20 19) 193.7743 51606.43 6.648E-10 (15, 3) R3----[19]
577(2 29 29)(11 28 29) 193.7779 51605.48 4.207E-11 (11, 2) -pQ12-[29]
578(3 19 20)(15 20 21) 193.7797 51604.99 7.360E-10 (15, 3) R1----[19]
579(3 19 1

O_2 の $X^3\Sigma_g^-$ 及び $B^3\Sigma_u^-$ の振動・回転準位

597(3	13	12)	(14	14	13)	193.8288	51591.93	2.065E-09	(14,	3)	R3----	[13]
598(1	27	28)	(7	28	29)	193.8289	51591.89	5.996E-06	(7,	1)	R1----	[27]
599(3	13	13)	(14	14	14)	193.8302	51591.54	2.199E-09	(14,	3)	R2----	[13]
600(1	27	27)	(7	28	27)	193.8326	51590.91	7.311E-09	(7,	1)	-rQ32-	[27]
601(3	13	13)	(14	14	13)	193.8359	51590.03	1.128E-11	(14,	3)	-rQ32-	[13]
602(3	13	14)	(14	14	15)	193.8375	51589.61	2.387E-09	(14,	3)	R1----	[13]
603(3	25	26)	(17	26	25)	193.8414	51588.57	5.045E-17	(17,	3)	--rP31	[25]
604(3	25	24)	(17	26	25)	193.8429	51588.16	8.840E-11	(17,	3)	R3----	[25]
605(0	27	28)	(4	30	29)	193.8483	51586.74	0.000E+00	(4,	0)	tR31--	[27]
606(3	25	25)	(17	26	25)	193.8496	51586.38	1.349E-13	(17,	3)	-rQ32-	[25]
607(3	23	24)	(16	24	24)	193.8546	51585.06	3.697E-13	(16,	3)	-rQ21-	[23]
608(3	25	26)	(17	26	26)	193.8576	51584.26	1.364E-13	(17,	3)	-rQ21-	[25]
609(3	23	23)	(16	24	24)	193.8628	51582.88	2.104E-10	(16,	3)	R2----	[23]
610(3	23	24)	(16	24	23)	193.8634	51582.71	1.605E-16	(16,	3)	--rP31	[23]
611(3	23	22)	(16	24	23)	193.8648	51582.34	2.035E-10	(16,	3)	R3----	[23]
612(3	29	30)	(20	30	29)	193.8648	51582.33	2.595E-18	(20,	3)	--rP31	[29]
613(3	25	25)	(17	26	26)	193.8658	51582.07	9.108E-11	(17,	3)	R2----	[25]
614(3	29	28)	(20	30	29)	193.8666	51581.86	8.101E-12	(20,	3)	R3----	[29]
615(1	3	4)	(6	6	5)	193.8696	51581.06	0.000E+00	(6,	1)	tR31--	[3]
616(3	23	23)	(16	24	23)	193.8716	51580.54	3.658E-13	(16,	3)	-rQ32-	[23]
617(3	29	29)	(20	30	29)	193.8732	51580.11	9.239E-15	(20,	3)	-rQ32-	[29]
618(3	23	24)	(16	24	25)	193.8737	51579.98	2.216E-10	(16,	3)	R1----	[23]
619(1	1	2)	(6	4	3)	193.8759	51579.38	0.000E+00	(6,	1)	tR31--	[1]
620(2	21	20)	(10	20	20)	193.8823	51577.68	7.970E-10	(10,	2)	-pQ23-	[21]
621(1	5	6)	(6	8	7)	193.8846	51577.07	0.000E+00	(6,	1)	tR31--	[5]
622(3	27	28)	(18	28	27)	193.8847	51577.05	1.498E-17	(18,	3)	--rP31	[27]
623(3	29	30)	(20	30	30)	193.8861	51576.67	9.338E-15	(20,	3)	-rQ21-	[29]
624(3	27	26)	(18	28	27)	193.8863	51576.61	3.540E-11	(18,	3)	R3----	[27]
625(2	21	20)	(10	20	19)	193.8870	51576.43	3.343E-07	(10,	2)	----P3	[21]
626(2	21	21)	(10	20	20)	193.8892	51575.86	3.476E-07	(10,	2)	----P2	[21]
627(3	19	18)	(15	18	18)	193.8892	51575.85	1.843E-12	(15,	3)	-pQ23-	[19]
628(2	21	22)	(10	20	21)	193.8923	51575.02	3.684E-07	(10,	2)	----P1	[21]
629(3	27	27)	(18	28	27)	193.8930	51574.84	4.646E-14	(18,	3)	-rQ32-	[27]
630(2	21	20)	(10	20	21)	193.8936	51574.69	4.520E-13	(10,	2)	pR13--	[21]
631(3	29	29)	(20	30	30)	193.8945	51574.44	8.305E-12	(20,	3)	R2----	[29]
632(3	19	19)	(15	18	18)	193.8961	51574.01	6.576E-10	(15,	3)	----P2	[19]
633(3	19	18)	(15	18	17)	193.8961	51574.00	6.294E-10	(15,	3)	----P3	[19]
634(3	15	16)	(14	18	17)	193.8968	51573.82	0.000E+00	(14,	3)	tR31--	[15]

VX= 0	GX(BAND ORIGIN):		.000 [1/cm]						
K	0	1	2	3	4	5			
FX	F1(+1)	.000	.999	6.705	15.303	26.784	41.144		
	F2(0)	.000	2.875	8.626	17.253	28.754	43.131		
	F3(-1)	.000	.008	6.449	15.170	26.716	41.121		
TX	F1(+1)	.000	.999	6.705	15.303	26.784	41.144		
	F2(0)	.000	2.875	8.626	17.253	28.754	43.131		
	F3(-1)	.000	.008	6.449	15.170	26.716	41.121		
K	6	7	8	9	10	11			
FX	F1(+1)	58.382	78.497	101.488	127.355	156.098	187.636		
	F2(0)	60.384	80.512	103.515	129.394	158.148	189.696		
	F3(-1)	58.394	78.539	101.557	127.449	156.216	187.775		
TX	F1(+1)	58.382	78.497	101.488	127.355	156.098	187.636		
	F2(0)	60.384	80.512	103.515	129.394	158.148	189.696		
	F3(-1)	58.394	78.539	101.557	127.449	156.216	187.775		
K	12	13	14	15	16	17			
FX	F1(+1)	222.130	259.501	299.747	342.669	388.666	437.539		
	F2(0)	224.201	261.581	301.837	344.768	390.775	439.657		
	F3(-1)	222.291	259.682	299.948	342.889	388.906	437.797		
TX	F1(+1)	222.130	259.501	299.747	342.669	388.666	437.539		
	F2(0)	224.201	261.581	301.837	344.768	390.775	439.657		
	F3(-1)	222.291	259.682	299.948	342.889	388.906	437.797		
K	18	19	20	21	22	23			
FX	F1(+1)	489.287	543.470	600.969	661.022	724.272	789.955		
	F2(0)	491.415	545.607	603.115	663.177	726.436	792.128		
	F3(-1)	489.564	543.766	601.283	661.354	724.623	790.323		
TX	F1(+1)	489.287	543.470	600.969	661.022	724.272	789.955		
	F2(0)	491.415	545.607	603.115	663.177	726.436	792.128		
	F3(-1)	489.564	543.766	601.283	661.354	724.623	790.323		
K	24	25	26	27	28	29			
FX	F1(+1)	858.956	930.271	1005.023	1081.924	1162.427	1244.925		
	F2(0)	861.138	932.462	1007.222	1084.133	1164.645	1247.151		
	F3(-1)	859.343	930.675	1005.445	1082.364	1162.885	1245.400		
TX	F1(+1)	858.956	930.271	1005.023	1081.924	1162.427	1244.925		
	F2(0)	861.138	932.462	1007.222	1084.133	1164.645	1247.151		
	F3(-1)	859.343	930.675	1005.445	1082.364	1162.885	1245.400		
K	30								
FX	F1(+1)	1331.179							
	F2(0)	1333.413							
	F3(-1)	1331.671							
TX	F1(+1)	1331.179							
	F2(0)	1333.413							
	F3(-1)	1331.671							
VX= 1	GX(BAND ORIGIN):		1556.385 [1/cm]						
K	0	1	2	3	4	5			
FX	F1(+1)	.000	.964	6.609	15.113	26.468	40.671		
	F2(0)	.000	2.844	8.532	17.064	28.439	42.659		
	F3(-1)	.000	.008	6.360	14.984	26.403	40.650		
TX	F1(+1)	1556.385	1557.349	1562.994	1571.498	1582.853	1597.056		
	F2(0)	1556.385	1559.229	1564.917	1573.448	1584.824	1599.044		
	F3(-1)	1556.385	1556.393	1562.745	1571.369	1582.788	1597.035		
K	6	7	8	9	10	11			
FX	F1(+1)	57.720	77.614	100.353	125.937	154.365	185.556		
	F2(0)	59.722	79.630	102.381	127.976	156.416	187.617		
	F3(-1)	57.734	77.658	100.424	126.033	154.484	185.697		
TX	F1(+1)	1614.105	1633.999	1656.738	1682.322	1710.750	1741.941		
	F2(0)	1616.107	1636.015	1658.766	1684.361	1712.801	1744.002		
	F3(-1)	1614.119	1634.043	1656.809	1682.418	1710.869	1742.082		
K	12	13	14	15	16	17			
FX	F1(+1)	219.673	256.634	296.439	338.888	384.381	432.719		
	F2(0)	221.744	258.715	298.530	340.988	386.491	434.838		
	F3(-1)	219.834	256.816	296.641	339.110	384.622	432.978		
TX	F1(+1)	1776.058	1813.019	1852.824	1895.273	1940.766	1989.104		
	F2(0)	1778.129	1815.100	1854.915	1897.373	1942.876	1991.223		
	F3(-1)	1776.219	1813.201	1853.026	1895.495	1941.007	1989.363		
K	18	19	20	21	22	23			
FX	F1(+1)	483.900	537.484	594.354	653.745	716.302	781.261		
	F2(0)	486.028	539.622	596.500	655.901	718.467	783.434		
	F3(-1)	484.178	537.781	594.669	654.078	716.654	781.630		
TX	F1(+1)	2040.285	2093.869	2150.739	2210.130	2272.688	2337.646		
	F2(0)	2042.413	2096.007	2152.885	2212.286	2274.852	2339.819		
	F3(-1)	2040.563	2094.166	2151.054	2210.463	2273.039	2338.015		
K	24	25	26	27	28	29			
FX	F1(+1)	849.506	920.033	993.966	1070.017	1149.638	1231.222		
	F2(0)	851.688	922.224	996.166	1072.226	1151.855	1233.448		
	F3(-1)	849.893	920.438	994.389	1070.457	1150.096	1231.697		
TX	F1(+1)	2405.891	2476.418	2550.351	2626.402	2706.023	2787.607		
	F2(0)	2408.073	2478.609	2552.551	2628.611	2708.240	2789.833		
	F3(-1)	2406.278	2476.823	2550.773	2626.842	2706.481	2788.082		
K	30								
FX	F1(+1)	1316.531							
	F2(0)	1318.766							
	F3(-1)	1317.024							
TX	F1(+1)	2872.916							
	F2(0)	2875.151							
	F3(-1)	2873.409							
VX= 2	GX(BAND ORIGIN):		3089.110 [1/cm]						
K	0	1	2	3	4	5			
FX	F1(+1)	.000	.930	6.512	14.923	26.153	40.200		
	F2(0)	.000	2.813	8.438	16.876	28.126	42.189		
	F3(-1)	.000	.008	6.271	14.799	26.092	40.182		
TX	F1(+1)	3089.110	3090.040	3095.623	3104.033	3115.263	3129.310		
	F2(0)	3089.110	3091.923	3097.548	3105.986	3117.236	3131.299		
	F3(-1)	3089.110	3089.118	3095.381	3103.909	3115.202	3129.299		

K	6	7	8	9	10	11
FX F1(+1)	57.061	76.736	99.225	124.527	152.642	183.488
F2(0)	59.065	78.753	101.254	126.567	154.693	185.550
F3(-1)	57.078	76.783	99.298	124.624	152.762	183.630
TX F1(+1)	3146.171	3165.846	3188.335	3213.637	3241.752	3272.598
F2(0)	3148.175	3167.863	3190.364	3215.677	3243.803	3274.660
F3(-1)	3146.188	3165.893	3188.408	3213.734	3241.872	3272.740
K	12	13	14	15	16	17
FX F1(+1)	217.229	253.783	293.150	335.129	380.121	427.926
F2(0)	219.301	255.865	295.241	337.230	382.232	430.046
F3(-1)	217.392	253.966	293.353	335.352	380.363	428.187
TX F1(+1)	3306.339	3342.893	3382.260	3424.240	3469.232	3517.036
F2(0)	3308.411	3344.975	3384.351	3426.340	3471.342	3519.156
F3(-1)	3306.502	3343.076	3382.463	3424.462	3469.473	3517.297
K	18	19	20	21	22	23
FX F1(+1)	478.544	531.533	587.776	646.510	708.378	772.616
F2(0)	480.673	533.671	589.923	648.666	710.543	774.790
F3(-1)	478.823	531.831	588.092	646.844	708.730	772.986
TX F1(+1)	3567.654	3620.643	3676.886	3735.620	3797.488	3861.726
F2(0)	3569.783	3622.781	3679.033	3737.776	3799.653	3863.900
F3(-1)	3567.933	3620.941	3677.202	3735.954	3797.840	3862.096
K	24	25	26	27	28	29
FX F1(+1)	840.109	909.854	982.972	1058.178	1136.922	1217.598
F2(0)	842.292	912.045	985.173	1060.387	1139.140	1219.824
F3(-1)	840.497	910.259	983.396	1058.619	1137.380	1218.073
TX F1(+1)	3929.219	3998.964	4072.083	4147.288	4226.032	4306.708
F2(0)	3931.402	4001.155	4074.283	4149.497	4228.250	4308.934
F3(-1)	3929.607	3999.369	4072.506	4147.729	4226.490	4307.184
K	30					
FX F1(+1)	1301.967					
F2(0)	1304.202					
F3(-1)	1302.460					
TX F1(+1)	4391.077					
F2(0)	4393.312					
F3(-1)	4391.570					
VX=3	GX(BAND ORIGIN): 4598.610[1/cm]					
K	0	1	2	3	4	5
FX F1(+1)	.000	.895	6.417	14.734	25.840	39.730
F2(0)	.000	2.781	8.344	16.688	27.814	41.721
F3(-1)	.000	.008	6.183	14.615	25.782	39.716
TX F1(+1)	4598.610	4599.505	4605.026	4613.344	4624.450	4638.340
F2(0)	4598.610	4601.391	4606.954	4615.298	4626.424	4640.331
F3(-1)	4598.610	4598.618	4604.793	4613.225	4624.392	4638.326
K	6	7	8	9	10	11
FX F1(+1)	56.405	75.861	98.101	123.122	150.925	181.428
F2(0)	58.409	77.879	100.130	125.163	152.977	183.490
F3(-1)	56.424	75.910	98.176	123.221	151.047	181.572
TX F1(+1)	4655.015	4674.471	4696.710	4721.732	4749.535	4780.038
F2(0)	4657.019	4676.489	4698.740	4723.773	4751.587	4782.100
F3(-1)	4655.034	4674.520	4696.786	4721.831	4749.657	4780.182
K	12	13	14	15	16	17
FX F1(+1)	214.795	250.943	289.873	331.385	375.878	423.152
F2(0)	216.867	253.025	291.965	333.486	377.988	425.272
F3(-1)	214.959	251.128	290.078	331.608	376.120	423.414
TX F1(+1)	4813.405	4849.553	4888.483	4929.995	4974.488	5021.762
F2(0)	4815.477	4851.635	4890.575	4932.096	4976.598	5023.882
F3(-1)	4813.569	4849.738	4888.688	4930.218	4974.730	5022.023
K	18	19	20	21	22	23
FX F1(+1)	473.208	525.605	581.224	639.302	700.484	764.004
F2(0)	475.337	527.743	583.371	641.458	702.649	766.178
F3(-1)	473.488	525.903	581.540	639.637	700.837	764.375
TX F1(+1)	5071.818	5124.215	5179.833	5237.912	5299.094	5362.614
F2(0)	5073.947	5126.353	5181.981	5240.068	5301.259	5364.788
F3(-1)	5072.098	5124.513	5180.150	5238.247	5299.447	5362.985
K	24	25	26	27	28	29
FX F1(+1)	830.749	899.713	972.021	1046.384	1124.254	1204.025
F2(0)	832.932	901.905	974.221	1048.593	1126.472	1206.252
F3(-1)	831.138	900.119	972.445	1046.825	1124.713	1204.502
TX F1(+1)	5429.359	5498.323	5570.631	5644.994	5722.864	5802.635
F2(0)	5431.542	5500.515	5572.831	5647.203	5725.082	5804.862
F3(-1)	5429.748	5498.729	5571.055	5645.435	5723.323	5803.111
K	30					
FX F1(+1)	1287.459					
F2(0)	1289.694					
F3(-1)	1287.952					
TX F1(+1)	5886.068					
F2(0)	5888.304					
F3(-1)	5886.563					
VA=0	GA(BAND ORIGIN): 49357.200[1/cm]					
K	0	1	2	3	4	5
FA F1(+1)	-.575	1.028	4.254	9.106	15.584	23.686
F2(0)	1.155	2.781	6.034	10.912	17.417	25.547
F3(-1)	1.155	1.155	4.412	9.314	15.844	24.001
TA F1(+1)	49356.630	49358.230	49361.450	49366.300	49372.780	49380.890
F2(0)	49358.360	49359.980	49363.230	49368.110	49374.620	49382.750
F3(-1)	49358.360	49358.360	49361.610	49366.510	49373.040	49381.200
K	6	7	8	9	10	11
FA F1(+1)	33.413	44.764	57.738	72.334	88.553	106.391
F2(0)	35.301	46.680	59.682	74.306	90.552	108.419
F3(-1)	33.782	45.189	58.218	72.870	89.144	107.038
TA F1(+1)	49390.610	49401.960	49414.940	49429.540	49445.750	49463.590
F2(0)	49392.500	49403.880	49416.880	49431.500	49447.750	49465.620
F3(-1)	49390.980	49402.390	49415.420	49430.070	49446.340	49464.240
K	12	13	14	15	16	17
FA F1(+1)	125.849	146.925	169.617	193.924	219.845	247.377
F2(0)	127.904	149.008	171.728	196.063	222.012	249.573
F3(-1)	126.552	147.684	170.432	194.795	220.771	248.360
TA F1(+1)	49483.050	49504.130	49526.820	49551.130	49577.040	49604.580
F2(0)	49485.110	49506.210	49528.930	49553.260	49579.210	49606.770
F3(-1)	49483.750	49504.880	49527.630	49551.990	49577.970	49605.560

K	18	19	20	21	22	23
FA F1(+1)	276.520	307.270	339.626	373.586	409.147	446.307
F2(0)	278.743	309.521	341.905	375.893	411.482	448.670
F3(-1)	277.558	308.364	340.776	374.792	410.409	447.625
TA F1(+1)	49633.720	49664.470	49696.820	49730.790	49766.350	49803.510
F2(0)	49635.940	49666.720	49699.110	49733.090	49768.680	49805.870
F3(-1)	49634.760	49665.560	49697.980	49731.990	49767.610	49804.820
K	24	25	26	27	28	29
FA F1(+1)	485.064	525.414	567.357	610.887	656.003	702.702
F2(0)	487.455	527.833	569.803	613.362	658.506	705.233
F3(-1)	486.438	526.844	568.842	612.429	657.601	704.356
TA F1(+1)	49842.260	49882.610	49924.550	49968.090	50013.200	50059.900
F2(0)	49844.650	49885.030	49927.000	49970.560	50015.710	50062.430
F3(-1)	49843.640	49884.040	49926.040	49969.630	50014.800	50061.550
K	30					
FA F1(+1)	750.980					
F2(0)	753.539					
F3(-1)	752.690					
TA F1(+1)	50108.180					
F2(0)	50110.740					
F3(-1)	50109.890					
VA=1	GA(BAND ORIGIN): 50045.750[1/cm]					
K	0	1	2	3	4	5
FA F1(+1)	-.593	.990	4.166	8.938	15.306	23.272
F2(0)	1.159	2.758	5.955	10.750	17.144	25.135
F3(-1)	1.159	1.159	4.333	9.144	15.559	23.573
TA F1(+1)	50045.160	50046.740	50049.910	50054.690	50061.050	50069.020
F2(0)	50046.910	50048.510	50051.700	50056.500	50062.890	50070.880
F3(-1)	50046.910	50046.910	50050.080	50054.890	50061.310	50069.320
K	6	7	8	9	10	11
FA F1(+1)	32.835	43.994	56.749	71.098	87.042	104.578
F2(0)	34.723	45.907	58.687	73.062	89.032	106.594
F3(-1)	33.186	44.395	57.200	71.601	87.596	105.184
TA F1(+1)	50078.590	50089.750	50102.500	50116.850	50132.790	50150.330
F2(0)	50080.470	50091.660	50104.440	50118.810	50134.780	50152.340
F3(-1)	50078.940	50090.140	50102.950	50117.350	50133.350	50150.930
K	12	13	14	15	16	17
FA F1(+1)	123.707	144.426	166.734	190.631	216.114	243.182
F2(0)	125.748	146.493	168.827	192.749	218.258	245.352
F3(-1)	124.363	145.134	167.494	191.442	216.977	244.096
TA F1(+1)	50169.460	50190.180	50212.480	50236.380	50261.860	50288.930
F2(0)	50171.500	50192.240	50214.580	50238.500	50264.010	50291.100
F3(-1)	50170.110	50190.880	50213.250	50237.190	50262.730	50289.850
K	18	19	20	21	22	23
FA F1(+1)	271.832	302.065	333.876	367.266	402.230	438.767
F2(0)	274.029	304.287	336.124	369.539	404.530	441.093
F3(-1)	272.799	303.083	334.947	368.388	403.404	439.993
TA F1(+1)	50317.580	50347.820	50379.630	50413.020	50447.980	50484.520
F2(0)	50319.780	50350.040	50381.880	50415.290	50450.280	50486.840
F3(-1)	50318.550	50348.830	50380.700	50414.140	50449.150	50485.740
K	24	25	26	27	28	29
FA F1(+1)	476.876	516.552	557.794	600.600	644.966	690.890
F2(0)	479.227	518.930	560.198	603.030	647.422	693.371
F3(-1)	478.153	517.882	559.176	602.033	646.451	692.427
TA F1(+1)	50522.630	50562.300	50603.540	50646.350	50690.710	50736.640</

K 30
FA F1(+1) 724.528
F2(0) 727.119
F3(-1) 726.301
TA F1(+1) 51435.440
F2(0) 51438.030
F3(-1) 51437.210
VA= 3 GA(BAND ORIGIN): 51351.170[1/cm]
K 0 1 2 3 4 5
FA F1(+1) -0.614 0.920 3.984 8.585 14.724 22.402
F2(0) 1.159 2.700 5.782 10.405 16.567 24.270
F3(-1) 1.159 1.159 4.182 8.811 14.992 22.716
TA F1(+1) 51350.560 51352.090 51355.160 51359.760 51365.890 51373.570
F2(0) 51352.330 51353.870 51356.950 51361.580 51367.740 51375.440
F3(-1) 51352.330 51352.330 51355.360 51359.980 51366.160 51373.890
K 6 7 8 9 10 11
FA F1(+1) 31.619 42.374 54.667 68.495 83.859 100.757
F2(0) 33.511 44.291 56.608 70.462 85.851 102.775
F3(-1) 31.980 42.784 55.126 69.005 84.419 101.368
TA F1(+1) 51382.790 51393.550 51405.840 51419.670 51435.030 51451.930
F2(0) 51384.680 51395.460 51407.780 51421.630 51437.020 51453.950
F3(-1) 51383.150 51393.960 51406.300 51420.180 51435.590 51452.540
K 12 13 14 15 16 17
FA F1(+1) 119.187 139.149 160.640 183.659 208.204 234.273
F2(0) 121.231 141.218 162.735 185.780 210.351 236.445
F3(-1) 119.849 139.862 161.405 184.475 209.071 235.192
TA F1(+1) 51470.360 51490.320 51511.810 51534.830 51559.380 51585.450
F2(0) 51472.400 51492.390 51513.910 51536.950 51561.520 51587.620
F3(-1) 51471.020 51491.040 51512.580 51535.650 51560.240 51586.360
K 18 19 20 21 22 23
FA F1(+1) 261.864 290.975 321.602 353.745 387.400 422.564
F2(0) 264.062 293.198 323.852 356.020 389.701 424.891
F3(-1) 262.834 291.997 322.676 354.870 388.577 423.792
TA F1(+1) 51613.040 51642.150 51672.770 51704.920 51738.570 51773.730
F2(0) 51615.230 51644.370 51675.020 51707.190 51740.870 51776.060
F3(-1) 51614.010 51643.170 51673.850 51706.040 51739.750 51774.960
K 24 25 26 27 28 29
FA F1(+1) 459.234 497.408 537.083 578.254 620.920 665.076
F2(0) 461.587 499.787 539.488 580.685 623.377 667.558
F3(-1) 460.515 498.741 538.467 579.690 622.408 666.615
TA F1(+1) 51810.410 51848.580 51888.250 51929.430 51972.090 52016.250
F2(0) 51812.760 51850.960 51890.660 51931.860 51974.550 52018.730
F3(-1) 51811.690 51849.910 51889.640 51930.860 51973.580 52017.790
K 30
FA F1(+1) 710.718
F2(0) 713.227
F3(-1) 712.310
TA F1(+1) 52061.890
F2(0) 52064.400
F3(-1) 52063.480
VA= 4 GA(BAND ORIGIN): 51969.690[1/cm]
K 0 1 2 3 4 5
FA F1(+1) -0.644 0.865 3.864 8.363 14.365 21.870
F2(0) 1.171 2.676 5.687 10.203 16.224 23.750
F3(-1) 1.171 1.171 4.085 8.598 14.631 22.174
TA F1(+1) 51969.050 51970.560 51973.550 51978.050 51984.050 51991.560
F2(0) 51970.860 51972.370 51975.380 51979.890 51985.910 51993.440
F3(-1) 51970.860 51970.860 51973.780 51978.290 51984.320 51991.870
K 6 7 8 9 10 11
FA F1(+1) 30.879 41.393 53.410 66.932 81.957 98.486
F2(0) 32.782 43.317 55.358 68.902 83.951 100.503
F3(-1) 31.225 41.782 53.844 67.411 82.482 99.057
TA F1(+1) 52000.570 52011.090 52023.100 52036.630 52051.650 52068.180
F2(0) 52002.470 52013.010 52025.050 52038.590 52053.640 52070.200
F3(-1) 52000.920 52011.470 52023.540 52037.100 52052.170 52068.750
K 12 13 14 15 16 17
FA F1(+1) 116.518 136.052 157.089 179.627 203.667 229.208
F2(0) 118.558 138.116 159.176 181.738 205.801 231.366
F3(-1) 117.135 136.716 157.800 180.385 204.472 230.060
TA F1(+1) 52086.210 52105.740 52126.780 52149.320 52173.360 52198.900
F2(0) 52088.250 52107.810 52128.870 52151.430 52175.490 52201.060
F3(-1) 52086.830 52106.410 52127.490 52150.080 52174.160 52199.750
K 18 19 20 21 22 23
FA F1(+1) 256.249 284.789 314.829 346.366 379.402 413.934
F2(0) 258.430 286.995 317.058 348.619 381.678 416.234
F3(-1) 257.148 285.736 315.823 347.409 380.491 415.071
TA F1(+1) 52225.940 52254.480 52284.520 52316.060 52349.090 52383.630
F2(0) 52228.120 52256.690 52286.750 52318.310 52351.370 52385.930
F3(-1) 52226.840 52255.430 52285.520 52317.100 52350.180 52384.760
K 24 25 26 27 28 29
FA F1(+1) 449.962 487.486 526.504 567.016 609.020 652.516
F2(0) 452.287 489.834 528.876 569.412 611.440 654.960
F3(-1) 451.147 488.719 527.784 568.344 610.396 653.940
TA F1(+1) 52419.650 52457.180 52496.200 52536.710 52578.710 52622.210
F2(0) 52421.980 52459.530 52498.570 52539.100 52581.130 52624.650
F3(-1) 52420.840 52458.410 52497.480 52538.040 52580.090 52623.630
K 30
FA F1(+1) 697.503
F2(0) 699.971
F3(-1) 698.975
TA F1(+1) 52667.200
F2(0) 52669.660
F3(-1) 52668.660

VA= 5 GA(BAND ORIGIN): 52561.390[1/cm]
K 0 1 2 3 4 5
FA F1(+1) -0.680 0.811 3.757 8.169 14.053 21.410
F2(0) 1.189 2.664 5.615 10.040 15.940 23.314
F3(-1) 1.189 1.189 4.005 8.415 14.320 21.707
TA F1(+1) 52560.710 52562.200 52565.150 52569.560 52575.450 52582.800
F2(0) 52562.580 52564.050 52567.000 52571.430 52577.330 52584.700
F3(-1) 52562.580 52562.580 52565.390 52569.800 52575.710 52583.100
K 6 7 8 9 10 11
FA F1(+1) 30.238 40.538 52.309 65.550 80.260 96.438
F2(0) 32.162 42.482 54.273 67.535 82.265 98.464
F3(-1) 30.571 40.908 52.719 66.000 80.751 96.970
TA F1(+1) 52591.630 52601.930 52613.700 52626.940 52641.650 52657.830
F2(0) 52593.550 52603.870 52615.660 52628.930 52643.660 52659.860
F3(-1) 52591.960 52602.300 52614.110 52627.390 52642.140 52658.360
K 12 13 14 15 16 17
FA F1(+1) 114.082 133.190 153.760 175.791 199.281 224.227
F2(0) 116.129 135.258 155.850 177.903 201.414 226.382
F3(-1) 114.656 133.806 154.419 176.493 200.026 225.015
TA F1(+1) 52675.470 52694.580 52715.150 52737.180 52760.670 52785.620
F2(0) 52677.520 52696.650 52717.240 52739.290 52762.800 52787.770
F3(-1) 52676.050 52695.200 52715.810 52737.880 52761.420 52786.410
K 18 19 20 21 22 23
FA F1(+1) 250.628 278.480 307.780 338.527 370.717 404.347
F2(0) 252.804 280.677 310.000 340.768 372.980 406.632
F3(-1) 251.458 279.353 308.697 339.488 371.721 405.395
TA F1(+1) 52812.020 52839.870 52869.170 52899.920 52932.110 52965.740
F2(0) 52814.200 52842.070 52871.390 52902.160 52934.370 52968.020
F3(-1) 52812.850 52840.740 52870.090 52900.880 52933.110 52966.790
K 24 25 26 27 28 29
FA F1(+1) 439.414 475.915 513.846 553.203 593.983 636.182
F2(0) 441.721 478.243 516.196 555.575 596.377 638.598
F3(-1) 440.505 477.050 515.024 554.425 595.249 637.491
TA F1(+1) 53000.800 53037.300 53075.240 53114.590 53155.380 53197.570
F2(0) 53003.110 53039.630 53077.590 53116.960 53157.770 53199.990
F3(-1) 53001.890 53038.440 53076.410 53115.820 53156.640 53198.880
K 30
FA F1(+1) 679.796
F2(0) 682.233
F3(-1) 681.149
TA F1(+1) 53241.190
F2(0) 53243.630
F3(-1) 53242.540
VA= 6 GA(BAND ORIGIN): 53122.790[1/cm]
K 0 1 2 3 4 5
FA F1(+1) -0.728 0.739 3.615 7.919 13.654 20.823
F2(0) 1.214 2.652 5.526 9.838 15.586 22.771
F3(-1) 1.214 1.214 3.910 8.192 13.938 21.131
TA F1(+1) 53122.060 53123.530 53126.410 53130.710 53136.450 53143.610
F2(0) 53124.000 53125.440 53128.320 53132.630 53138.380 53145.560
F3(-1) 53124.000 53124.000 53126.700 53130.980 53136.730 53143.920
K 6 7 8 9 10 11
FA F1(+1) 29.427 39.464 50.934 63.837 78.172 93.937
F2(0) 31.391 41.446 52.935 65.857 80.211 95.996
F3(-1) 29.764 39.834 51.340 64.280 78.652 94.456
TA F1(+1) 53152.210 53162.250 53173.720 53186.630 53200.960 53216.730
F2(0) 53154.180 53164.230 53175.720 53188.640 53203.000 53218.790
F3(-1) 53152.550 53162.630 53174.130 53187.070 53201.440 53217.250
K 12 13 14 15 16 17
FA F1(+1) 111.132 129.754 149.802 171.276 194.172 218.489
F2(0) 113.210 131.852 151.921 173.414 196.331 220.668
F3(-1) 111.690 130.352 150.440 171.954 194.890 219.248
TA F1(+1) 53233.920 53252.540 53272.590 53294.070 53316.960 53341.280
F2(0) 53236.000 53254.640 53274.710 53296.200 53319.120 53343.460
F3(-1) 53234.480 53253.140 53273.230 53294.740 53317.680 53342.040
K 18 19 20 21 22 23
FA F1(+1) 244.225 271.378 299.946 329.925 361.314 394.111
F2(0) 246.425 273.598 302.186 332.187 363.596 396.413
F3(-1) 245.025 272.219 300.827 330.848 362.278 395.116
TA F1(+1) 53367.020 53394.170 53422.730 53452.710 53484.100 53516.900
F2(0) 53369.210 53396.390 53424.980 53454.980 53486.390 53519.200
F3(-1) 53367.810 53395.010 53423.620 53453.640 53485.070 53517.910
K 24 25 26 27 28 29
FA F1(+1) 428.311 463.913 500.913 539.308 579.096 620.272
F2(0) 430.634 466.257 503.278 541.694 581.502 622.699
F3(-1) 429.357 465.000 502.042 540.479 580.308 621.525
TA F1(+1) 53551.100 53586.700 53623.700 53662.100 53701.880 53743.060
F2(0) 53553.420 53589.050 53626.070 53664.480 53704.290 53745.490
F3(-1) 53552.140 53587.790 53624.830 53663.270 53703.100 53744.310
K 30
FA F1(+1) 662.833
F2(0) 665.281
F3(-1) 664.128
TA F1(+1) 53785.620
F2(0) 53788.070
F3(-1) 53786.920
VA= 7 GA(BAND ORIGIN): 53655.960[1/cm]
K 0 1 2 3 4 5
FA F1(+1) -0.770 0.674 3.485 7.685 13.280 20.271
F2(0) 1.234 2.636 5.440 9.645 15.251 22.257
F3(-1) 1.234 1.234 3.825 7.988 13.587 20.598
TA F1(+1) 53655.190 53656.640 53659.450 53663.640 53669.240 53676.230
F2(0) 53657.200 53658.600 53661.400 53665.610 53671.210 53678.220
F3(-1) 53657.200 53657.200 53659.790 53663.950 53669.550 53676.560

		6		7		8		9		10		11	
FA	F1(+1)	28.660		38.445		49.626		62.200		76.167		91.524	
	F2(0)	30.661		40.463		51.662		64.255		78.240		93.616	
	F3(-1)	29.013		38.830		50.044		62.654		76.657		92.052	
TA	F1(+1)	53684.620	53694.410	53705.590	53718.160	53732.130	53747.480						
	F2(0)	53686.620	53696.430	53707.620	53720.210	53734.200	53749.580						
	F3(-1)	53684.970	53694.790	53706.000	53718.610	53732.620	53748.010						
		12		13		14		15		16		17	
FA	F1(+1)	108.269	126.400	145.913	166.807	189.078	212.723						
	F2(0)	110.381	128.531	148.065	168.979	191.270	214.935						
	F3(-1)	108.835	127.005	146.558	167.492	189.803	213.488						
TA	F1(+1)	53764.230	53782.360	53801.880	53822.770	53845.040	53868.680						
	F2(0)	53766.340	53784.490	53804.030	53824.940	53847.230	53870.890						
	F3(-1)	53764.800	53782.960	53802.520	53823.450	53845.770	53869.450						
		18		19		20		21		22		23	
FA	F1(+1)	237.738	264.120	291.864	320.967	351.424	383.231						
	F2(0)	239.970	266.372	294.137	323.261	353.738	385.566						
	F3(-1)	238.543	264.966	292.751	321.895	352.393	384.244						
TA	F1(+1)	53893.700	53920.080	53947.820	53976.930	54007.390	54039.190						
	F2(0)	53895.930	53922.330	53950.100	53979.220	54009.700	54041.530						
	F3(-1)	53894.500	53920.930	53948.710	53977.860	54008.360	54040.200						
		24		25		26		27		28		29	
FA	F1(+1)	416.383	450.874	486.701	523.857	562.338	602.136						
	F2(0)	418.738	453.251	489.098	526.275	564.776	604.595						
	F3(-1)	417.434	451.967	487.835	525.032	563.554	603.394						
TA	F1(+1)	54072.340	54106.840	54142.660	54179.820	54218.300	54258.100						
	F2(0)	54074.700	54109.210	54145.060	54182.230	54220.740	54260.550						
	F3(-1)	54073.390	54107.930	54143.800	54180.990	54219.520	54259.360						
		30		31		32		33		34		35	
FA	F1(+1)	643.246											
	F2(0)	645.726											
	F3(-1)	644.546											
TA	F1(+1)	54299.210											
	F2(0)	54301.690											
	F3(-1)	54300.510											
VA=		B GA(BAND ORIGIN): 54156.220[1/cm]											
		0		1		2		3		4		5	
FA	F1(+1)	-0.870		0.549		3.275		7.336		12.742		19.495	
	F2(0)	1.296		2.650		5.358		9.419		14.834		21.600	
	F3(-1)	1.296		1.296		3.727		7.723		13.120		19.887	
TA	F1(+1)	54155.350	54156.770	54159.490	54163.550	54168.960	54175.710						
	F2(0)	54157.520	54158.870	54161.580	54165.640	54171.050	54177.820						
	F3(-1)	54157.520	54157.520	54159.950	54163.940	54169.340	54176.110						
		6		7		8		9		10		11	
FA	F1(+1)	27.598	37.050	47.849	59.997	73.490	88.328						
	F2(0)	29.719	39.187	50.006	62.172	75.685	90.544						
	F3(-1)	28.014	37.495	48.329	60.513	74.044	88.922						
TA	F1(+1)	54183.820	54193.270	54204.070	54216.210	54229.710	54244.550						
	F2(0)	54185.940	54195.410	54206.220	54218.390	54231.900	54246.760						
	F3(-1)	54184.230	54193.710	54204.550	54216.730	54230.260	54245.140						
		12		13		14		15		16		17	
FA	F1(+1)	104.509	122.031	140.892	161.090	182.622	205.487						
	F2(0)	106.745	124.288	143.171	163.390	184.945	207.831						
	F3(-1)	105.144	122.707	141.611	161.851	183.427	206.335						
TA	F1(+1)	54260.730	54278.250	54297.110	54317.310	54338.840	54361.710						
	F2(0)	54262.960	54280.510	54299.390	54319.610	54341.160	54364.050						
	F3(-1)	54261.360	54278.930	54297.830	54318.070	54339.640	54362.550						
		18		19		20		21		22		23	
FA	F1(+1)	229.680	255.200	282.044	310.207	339.688	370.481						
	F2(0)	232.047	257.589	284.454	312.640	342.143	372.959						
	F3(-1)	230.572	256.136	283.024	311.232	340.757	371.595						
TA	F1(+1)	54385.900	54411.420	54438.260	54466.430	54495.910	54526.700						
	F2(0)	54388.270	54413.810	54440.670	54468.860	54498.360	54529.180						
	F3(-1)	54386.790	54412.360	54439.240	54467.450	54496.980	54527.810						
		24		25		26		27		28		29	
FA	F1(+1)	402.584	435.993	470.703	506.711	544.012	582.602						
	F2(0)	405.084	438.516	473.249	509.279	546.603	585.215						
	F3(-1)	403.743	437.196	471.952	508.005	545.351	583.986						
TA	F1(+1)	54558.800	54592.210	54626.920	54662.930	54700.230	54738.820						
	F2(0)	54561.300	54594.730	54629.470	54665.500	54702.820	54741.430						
	F3(-1)	54559.960	54593.410	54628.170	54664.220	54701.570	54740.200						
		30		31		32		33		34		35	
FA	F1(+1)	622.476											
	F2(0)	625.112											
	F3(-1)	623.905											
TA	F1(+1)	54778.700											
	F2(0)	54781.330											
	F3(-1)	54780.130											
VA=		9 GA(BAND ORIGIN): 54622.140[1/cm]											
		0		1		2		3		4		5	
FA	F1(+1)	-1.019		0.388		3.032		6.953		12.164		18.670	
	F2(0)	1.381		2.684		5.289		9.197		14.407		20.918	
	F3(-1)	1.381		1.381		3.630		7.434		12.607		19.105	
TA	F1(+1)	54621.120	54622.530	54625.170	54629.090	54634.300	54640.810						
	F2(0)	54623.520	54624.820	54627.430	54631.340	54636.550	54643.060						
	F3(-1)	54623.520	54623.520	54625.770	54629.570	54634.750	54641.250						
		6		7		8		9		10		11	
FA	F1(+1)	26.473	35.572	45.969	57.662	70.650	84.932						
	F2(0)	28.730	37.841	48.251	59.958	72.961	87.259						
	F3(-1)	26.917	36.035	46.455	58.175	71.194	85.508						
TA	F1(+1)	54648.610	54657.710	54668.110	54679.800	54692.790	54707.070						
	F2(0)	54650.870	54659.980	54670.390	54682.100	54695.100	54709.400						
	F3(-1)	54649.060	54658.180	54668.590	54680.320	54693.340	54707.650						
		12		13		14		15		16		17	
FA	F1(+1)	100.506	117.371	135.525	154.965	175.690	197.698						
	F2(0)	102.850	119.731	137.902	157.359	178.102	200.126						
	F3(-1)	101.116	118.017	136.206	155.684	176.446	198.491						
TA	F1(+1)	54722.650	54739.510	54757.660	54777.110	54797.830	54819.840						
	F2(0)	54724.990	54741.870	54760.040	54779.500	54800.240	54822.270						
	F3(-1)	54723.260	54740.160	54758.350	54777.820	54798.590	54820.630						

K 30
FA F1(+1) 543.886
F2(0) 547.263
F3(-1) 546.263
TA F1(+1) 55982.690
F2(0) 55986.060
F3(-1) 55985.060
VA= 12 GA(BAND ORIGIN): 55784.630[1/cm]
K 0 1 2 3 4 5
FA F1(+1) -1.461 -1.164 2.149 5.539 10.029 15.627
F2(0) 1.634 2.759 5.009 8.384 12.881 18.500
F3(-1) 1.634 1.634 3.418 6.621 11.057 16.661
TA F1(+1) 55783.170 55784.460 55786.780 55790.170 55794.660 55800.250
F2(0) 55786.260 55787.390 55789.640 55793.010 55797.510 55803.130
F3(-1) 55786.260 55786.260 55788.050 55791.250 55795.690 55801.290
K 6 7 8 9 10 11
FA F1(+1) 22.337 30.160 39.096 49.142 60.297 72.557
F2(0) 25.240 33.098 42.072 52.159 63.357 75.662
F3(-1) 23.410 31.291 40.296 50.420 61.658 74.006
TA F1(+1) 55806.960 55814.790 55823.720 55833.770 55844.930 55857.190
F2(0) 55809.870 55817.730 55826.700 55836.790 55847.980 55860.290
F3(-1) 55808.040 55815.920 55824.930 55835.050 55846.290 55858.640
K 12 13 14 15 16 17
FA F1(+1) 85.920 100.381 115.938 132.584 150.315 169.127
F2(0) 89.070 103.578 119.181 135.875 153.654 172.514
F3(-1) 87.460 102.015 117.667 134.410 152.240 171.152
TA F1(+1) 55870.550 55885.010 55900.570 55917.210 55934.950 55953.760
F2(0) 55873.700 55888.210 55903.810 55920.500 55938.280 55957.140
F3(-1) 55872.090 55886.640 55902.300 55919.040 55936.870 55955.780
K 18 19 20 21 22 23
FA F1(+1) 189.014 209.969 231.987 255.060 279.183 304.348
F2(0) 192.449 213.453 235.519 258.642 282.814 308.028
F3(-1) 191.138 212.195 234.314 257.491 281.716 306.985
TA F1(+1) 55973.640 55994.600 56016.620 56039.690 56063.810 56088.980
F2(0) 55977.080 55998.080 56020.150 56043.270 56067.440 56092.660
F3(-1) 55975.770 55996.820 56018.940 56042.120 56066.340 56091.610
K 24 25 26 27 28 29
FA F1(+1) 330.547 357.773 386.017 415.271 445.526 476.772
F2(0) 334.276 361.551 389.845 419.148 449.452 480.747
F3(-1) 333.288 360.617 388.966 418.324 448.684 480.035
TA F1(+1) 56115.180 56142.400 56170.640 56199.900 56230.160 56261.400
F2(0) 56118.910 56146.180 56174.470 56203.780 56234.080 56265.380
F3(-1) 56117.920 56145.250 56173.590 56202.950 56233.310 56264.660
K 30
FA F1(+1) 509.001
F2(0) 513.025
F3(-1) 512.369
TA F1(+1) 56293.630
F2(0) 56297.650
F3(-1) 56297.000
VA= 13 GA(BAND ORIGIN): 56085.620[1/cm]
K 0 1 2 3 4 5
FA F1(+1) -1.657 -1.428 1.726 4.872 9.035 14.226
F2(0) 1.757 2.806 4.902 8.046 12.235 17.469
F3(-1) 1.757 1.757 3.380 6.344 10.477 15.710
TA F1(+1) 56083.960 56085.190 56087.350 56090.490 56094.660 56099.850
F2(0) 56087.380 56088.430 56090.520 56093.670 56097.860 56103.090
F3(-1) 56087.380 56087.380 56089.000 56091.960 56096.100 56101.330
K 6 7 8 9 10 11
FA F1(+1) 20.450 27.707 35.997 45.317 55.667 67.041
F2(0) 23.746 31.063 39.417 48.806 59.225 70.671
F3(-1) 22.014 29.375 37.785 47.235 57.721 69.238
TA F1(+1) 56106.070 56113.330 56121.620 56130.940 56141.290 56152.660
F2(0) 56109.370 56116.680 56125.040 56134.430 56144.850 56156.290
F3(-1) 56107.640 56115.000 56123.410 56132.860 56143.340 56154.860
K 12 13 14 15 16 17
FA F1(+1) 79.436 92.848 107.272 122.703 139.134 156.561
F2(0) 83.140 96.627 111.126 126.633 143.141 160.644
F3(-1) 81.780 95.341 109.918 125.503 142.090 159.674
TA F1(+1) 56165.060 56178.470 56192.890 56208.320 56224.750 56242.180
F2(0) 56168.760 56182.250 56196.750 56212.250 56228.760 56246.270
F3(-1) 56167.400 56180.960 56195.540 56211.130 56227.710 56245.290
K 18 19 20 21 22 23
FA F1(+1) 174.975 194.371 214.740 236.076 258.369 281.612
F2(0) 179.136 198.609 219.057 240.471 262.842 286.163
F3(-1) 178.247 197.802 218.332 239.828 262.283 285.688
TA F1(+1) 56260.600 56279.990 56300.360 56321.700 56343.990 56367.230
F2(0) 56264.760 56284.230 56304.680 56326.090 56348.460 56371.790
F3(-1) 56263.870 56283.420 56303.950 56325.450 56347.910 56371.310
K 24 25 26 27 28 29
FA F1(+1) 305.795 330.909 356.944 383.891 411.738 440.474
F2(0) 310.425 335.617 361.731 388.756 416.682 445.496
F3(-1) 310.034 335.311 361.510 388.620 416.631 445.531
TA F1(+1) 56391.420 56416.530 56442.570 56469.510 56497.360 56526.090
F2(0) 56396.050 56421.240 56447.350 56474.380 56502.300 56531.120
F3(-1) 56395.660 56420.930 56447.130 56474.240 56502.250 56531.150
K 30
FA F1(+1) 470.089
F2(0) 475.190
F3(-1) 475.311
TA F1(+1) 56555.710
F2(0) 56560.810
F3(-1) 56560.930

VA= 14 GA(BAND ORIGIN): 56340.600[1/cm]
K 0 1 2 3 4 5
FA F1(+1) -2.050 -1.867 1.144 4.054 7.893 12.678
F2(0) 1.989 2.956 4.889 7.787 11.648 16.471
F3(-1) 1.989 1.989 3.423 6.104 9.886 14.696
TA F1(+1) 56338.550 56339.730 56341.750 56344.660 56348.500 56353.280
F2(0) 56342.590 56343.560 56345.490 56348.390 56352.250 56357.070
F3(-1) 56342.590 56342.590 56344.020 56346.710 56350.490 56355.300
K 6 7 8 9 10 11
FA F1(+1) 18.414 25.105 32.752 41.352 50.905 61.407
F2(0) 22.254 28.992 36.683 45.323 54.906 65.429
F3(-1) 20.498 27.273 35.007 43.691 53.316 63.874
TA F1(+1) 56359.020 56365.710 56373.350 56381.950 56391.510 56402.010
F2(0) 56362.860 56369.590 56377.290 56385.930 56395.510 56406.030
F3(-1) 56361.100 56367.880 56375.610 56384.290 56393.920 56404.480
K 12 13 14 15 16 17
FA F1(+1) 72.855 85.244 98.568 112.823 128.002 144.099
F2(0) 76.886 89.270 102.575 116.794 131.920 147.945
F3(-1) 75.358 87.758 101.067 115.277 130.378 146.361
TA F1(+1) 56413.460 56425.840 56439.170 56453.430 56468.610 56484.700
F2(0) 56417.490 56429.870 56443.180 56457.390 56472.520 56488.550
F3(-1) 56415.960 56428.360 56441.670 56455.880 56470.980 56486.960
K 18 19 20 21 22 23
FA F1(+1) 161.106 179.015 197.819 217.508 238.073 259.505
F2(0) 164.859 182.655 201.323 220.851 241.232 262.452
F3(-1) 163.216 180.933 199.501 218.909 239.145 260.197
TA F1(+1) 56501.710 56519.620 56538.420 56558.110 56578.680 56600.110
F2(0) 56505.460 56523.260 56541.930 56561.450 56581.830 56603.050
F3(-1) 56503.820 56521.540 56540.100 56559.510 56579.750 56600.800
K 24 25 26 27 28 29
FA F1(+1) 281.792 304.925 328.891 353.680 379.277 405.672
F2(0) 284.500 307.366 331.035 355.495 380.733 406.735
F3(-1) 282.052 304.697 328.118 352.301 377.232 402.896
TA F1(+1) 56622.390 56645.530 56669.490 56694.280 56719.880 56746.270
F2(0) 56625.100 56647.970 56671.640 56696.100 56721.340 56747.340
F3(-1) 56622.650 56645.300 56668.720 56692.900 56717.840 56743.500
K 30
FA F1(+1) 432.850
F2(0) 433.486
F3(-1) 429.276
TA F1(+1) 56773.450
F2(0) 56774.090
F3(-1) 56769.880
VA= 15 GA(BAND ORIGIN): 56550.700[1/cm]
K 0 1 2 3 4 5
FA F1(+1) -2.682 -1.550 3.310 2.964 6.450 10.786
F2(0) 2.364 3.243 4.999 7.633 11.141 15.522
F3(-1) 2.364 2.364 3.608 5.987 9.390 13.748
TA F1(+1) 56548.020 56549.150 56551.010 56553.660 56557.150 56561.480
F2(0) 56553.060 56553.940 56555.700 56558.330 56561.840 56566.220
F3(-1) 56553.060 56553.060 56554.310 56556.690 56560.090 56564.450
K 6 7 8 9 10 11
FA F1(+1) 15.982 22.043 28.971 36.765 45.424 54.945
F2(0) 20.773 26.889 33.867 41.702 50.388 59.919
F3(-1) 19.018 25.176 32.205 40.090 48.821 58.386
TA F1(+1) 56566.680 56572.740 56579.670 56587.460 56596.130 56605.640
F2(0) 56571.470 56577.590 56584.570 56592.400 56601.090 56610.620
F3(-1) 56569.720 56575.880 56582.900 56590.790 56599.520 56609.090
K 12 13 14 15 16 17
FA F1(+1) 65.324 76.555 88.634 101.555 115.309 129.890
F2(0) 70.288 81.488 93.512 106.350 119.994 134.434
F3(-1) 68.776 79.980 91.987 104.786 118.365 132.713
TA F1(+1) 56616.020 56627.250 56639.330 56652.250 56666.010 56680.590
F2(0) 56620.990 56632.190 56644.210 56657.050 56670.700 56685.130
F3(-1) 56619.480 56630.680 56642.690 56655.480 56669.070 56683.410
K 18 19 20 21 22 23
FA F1(+1) 145.290 161.498 178.506 196.304 214.880 234.223
F2(0) 149.659 165.658 182.420 199.933 218.183 237.158
F3(-1) 147.818 163.665 180.242 197.533 215.526 234.203
TA F1(+1) 56695.990 56712.200 56729.210 56747.000 56765.580 56784.920
F2(0) 56700.360 56716.360 56733.120 56750.630 56768.880 56787.860
F3(-1) 56698.520 56714.360 56730.940 56748.230 56766.230 56784.900
K 24 25 26 27 28 29
FA F1(+1) 254.321 275.161 296.730 319.013 341.996 365.665
F2(0) 256.844 277.225 298.286 320.013 342.387 365.393
F3(-1) 253.550 273.549 294.183 315.436 337.288 359.720
TA F1(+1) 56805.020 56825.860 56847.430 56869.710 56892.700 56916.360
F2(0) 56807.540 56827.930 56848.980 56870.710 56893.090 56916.090
F3(-1) 56804.250 56824.250 56844.880 56866.140 56887.990 56910.420
K 30
FA F1(+1) 390.002
F2(0) 389.012
F3(-1) 382.713
TA F1(+1) 56940.700
F2(0) 56939.710
F3(-1) 56933.410
VA= 16 GA(BAND ORIGIN): 56719.560[1/cm]
K 0 1 2 3 4 5
FA F1(+1) -3.707 -2.642 -1.945 1.438 4.544 8.395
F2(0) 2.981 3.768 5.342 7.701 10.843 14.764
F3(-1) 2.981 2.981 4.049 6.129 9.147 13.042
TA F1(+1) 56715.850 56716.920 56718.610 56721.000 56724.100 56727.950
F2(0) 56722.540 56723.330 56724.900 56727.260 56730.400 56734.320
F3(-1) 56722.540 56722.540 56723.610 56725.690 56728.710 56732.600

K	6	7	8	9	10	11
FA F1(+1)	13.003	18.375	24.515	31.421	39.093	47.527
F2(0)	19.462	24.932	31.168	38.165	45.915	54.413
F3(-1)	17.773	23.310	29.633	36.722	44.565	53.148
TA F1(+1)	56732.560	56737.930	56744.070	56750.980	56758.650	56767.090
F2(0)	56739.020	56744.490	56750.730	56757.720	56765.470	56773.970
F3(-1)	56737.330	56742.870	56749.190	56756.280	56764.130	56772.710
K	12	13	14	15	16	17
FA F1(+1)	56.718	66.660	77.346	88.770	100.921	113.792
F2(0)	63.649	73.614	84.300	95.695	107.789	120.570
F3(-1)	62.457	72.481	83.205	94.616	106.701	119.445
TA F1(+1)	56776.280	56786.220	56796.910	56808.330	56820.480	56833.350
F2(0)	56783.210	56793.170	56803.860	56815.250	56827.350	56840.130
F3(-1)	56782.020	56792.040	56802.760	56814.180	56826.260	56839.000
K	18	19	20	21	22	23
FA F1(+1)	127.370	141.646	156.607	172.241	188.534	205.472
F2(0)	134.024	148.140	162.902	178.297	194.308	210.919
F3(-1)	132.834	146.850	161.479	176.703	192.505	208.865
TA F1(+1)	56846.930	56861.200	56876.160	56891.800	56908.090	56925.030
F2(0)	56853.580	56867.700	56882.460	56897.860	56913.870	56930.480
F3(-1)	56852.390	56866.410	56881.040	56896.260	56912.060	56928.430
K	24	25	26	27	28	29
FA F1(+1)	223.040	241.223	260.003	279.363	299.286	319.751
F2(0)	228.114	245.874	264.181	283.016	302.358	322.188
F3(-1)	225.766	243.187	261.108	279.507	298.363	317.654
TA F1(+1)	56942.600	56960.780	56979.560	56998.920	57018.840	57039.310
F2(0)	56947.670	56965.430	56983.740	57002.570	57021.920	57041.750
F3(-1)	56945.320	56962.750	56980.670	56999.070	57017.920	57037.210
K	30					
FA F1(+1)	340.741					
F2(0)	342.484					
F3(-1)	337.355					
TA F1(+1)	57060.300					
F2(0)	57062.040					
F3(-1)	57056.910					
VA= 17	GA(BAND ORIGIN): 56852.560[1/cm]					
K	0	1	2	3	4	5
FA F1(+1)	-5.055	-4.097	-2.604	-1.537	2.135	5.431
F2(0)	3.801	4.493	5.874	7.945	10.702	14.142
F3(-1)	3.801	3.801	4.718	6.522	9.168	12.612
TA F1(+1)	56847.500	56848.460	56849.950	56852.020	56854.700	56857.990
F2(0)	56856.360	56857.050	56858.430	56860.500	56863.260	56866.700
F3(-1)	56856.360	56856.360	56857.280	56859.080	56861.730	56865.170
K	6	7	8	9	10	11
FA F1(+1)	9.364	13.939	19.161	25.026	31.533	38.676
F2(0)	18.262	23.056	28.519	34.644	41.424	48.852
F3(-1)	16.817	21.755	27.405	33.748	40.770	48.458
TA F1(+1)	56861.920	56866.500	56871.720	56877.590	56884.090	56891.230
F2(0)	56870.820	56875.610	56881.080	56887.200	56893.980	56901.410
F3(-1)	56869.380	56874.310	56879.960	56886.310	56893.330	56901.020
K	12	13	14	15	16	17
FA F1(+1)	46.448	54.842	63.848	73.456	83.655	94.433
F2(0)	56.918	65.612	74.925	84.845	95.361	106.458
F3(-1)	56.797	65.777	75.383	85.604	96.426	107.835
TA F1(+1)	56899.010	56907.400	56916.410	56926.020	56936.210	56946.990
F2(0)	56909.480	56918.170	56927.480	56937.400	56947.920	56959.020
F3(-1)	56909.360	56918.340	56927.940	56938.160	56948.980	56960.390
K	18	19	20	21	22	23
FA F1(+1)	105.777	117.672	130.104	143.057	156.514	170.458
F2(0)	118.124	130.344	143.104	156.386	170.174	184.451
F3(-1)	119.817	132.357	145.439	159.046	173.162	187.768
TA F1(+1)	56958.340	56970.230	56982.660	56995.620	57009.070	57023.020
F2(0)	56970.680	56982.900	56995.660	57008.950	57022.730	57037.010
F3(-1)	56972.380	56984.910	56998.000	57011.610	57025.720	57040.330
K	24	25	26	27	28	29
FA F1(+1)	184.871	199.733	215.025	230.726	246.814	263.267
F2(0)	199.197	214.395	230.023	246.061	262.488	279.280
F3(-1)	202.845	218.376	234.338	250.711	267.474	284.604
TA F1(+1)	57037.430	57052.290	57067.580	57083.290	57099.370	57115.820
F2(0)	57051.760	57066.950	57082.580	57098.620	57115.050	57131.840
F3(-1)	57055.400	57070.930	57086.890	57103.270	57120.030	57137.160
K	30					
FA F1(+1)	280.062					
F2(0)	296.415					
F3(-1)	302.077					
TA F1(+1)	57132.620					
F2(0)	57148.970					
F3(-1)	57154.640					
VA= 18	GA(BAND ORIGIN): 56954.570[1/cm]					
K	0	1	2	3	4	5
FA F1(+1)	-5.055	-4.097	-2.604	-1.537	2.135	5.431
F2(0)	3.801	4.493	5.874	7.945	10.702	14.142
F3(-1)	3.801	3.801	4.718	6.522	9.168	12.612
TA F1(+1)	56949.520	56950.470	56951.960	56954.040	56956.710	56960.000
F2(0)	56958.370	56959.060	56960.450	56962.520	56965.270	56968.710
F3(-1)	56958.370	56958.370	56959.290	56961.090	56963.740	56967.180
K	6	7	8	9	10	11
FA F1(+1)	9.364	13.939	19.161	25.026	31.533	38.676
F2(0)	18.262	23.056	28.519	34.644	41.424	48.852
F3(-1)	16.817	21.755	27.405	33.748	40.770	48.458
TA F1(+1)	56963.930	56968.510	56973.730	56979.600	56986.100	56993.250
F2(0)	56972.830	56977.630	56983.090	56989.210	56996.000	57003.420
F3(-1)	56971.390	56976.320	56981.980	56988.320	56995.340	57003.030
K	12	13	14	15	16	17
FA F1(+1)	46.448	54.842	63.848	73.456	83.655	94.433
F2(0)	56.918	65.612	74.925	84.845	95.361	106.458
F3(-1)	56.797	65.777	75.383	85.604	96.426	107.835
TA F1(+1)	57001.020	57009.410	57018.420	57028.030	57038.230	57049.000
F2(0)	57011.490	57020.180	57029.500	57039.410	57049.930	57061.030
F3(-1)	57011.370	57020.350	57029.950	57040.180	57051.000	57062.410

	K	18	19	20	21	22	23
FA	F1(+1)	105.777	117.672	130.104	143.057	156.514	170.458
	F2(0)	118.124	130.344	143.104	156.386	170.174	184.451
	F3(-1)	119.817	132.357	145.439	159.046	173.162	187.768
TA	F1(+1)	57060.350	57072.240	57084.680	57097.630	57111.090	57125.030
	F2(0)	57072.700	57084.910	57097.680	57110.960	57124.750	57139.020
	F3(-1)	57074.390	57086.930	57100.010	57113.620	57127.730	57142.340
	K	24	25	26	27	28	29
FA	F1(+1)	184.871	199.733	215.025	230.726	246.814	263.267
	F2(0)	199.197	214.395	230.023	246.061	262.488	279.280
	F3(-1)	202.845	218.376	234.338	250.711	267.474	284.604
TA	F1(+1)	57139.440	57154.300	57169.590	57185.300	57201.380	57217.840
	F2(0)	57153.770	57168.960	57184.590	57200.630	57217.060	57233.850
	F3(-1)	57157.410	57172.950	57188.910	57205.280	57222.040	57239.180
	K	30					
FA	F1(+1)	280.062					
	F2(0)	296.415					
	F3(-1)	302.077					
TA	F1(+1)	57234.630					
	F2(0)	57250.980					
	F3(-1)	57256.650					
VA= 19		GA(BAND ORIGIN): 57030.290[1/cm]					
	K	0	1	2	3	4	5
FA	F1(+1)	-5.055	-4.097	-2.604	-1.537	2.135	5.431
	F2(0)	3.801	4.493	5.874	7.945	10.702	14.142
	F3(-1)	3.801	3.801	4.718	6.522	9.168	12.612
TA	F1(+1)	57025.230	57026.190	57027.680	57029.750	57032.430	57035.720
	F2(0)	57034.090	57034.780	57036.160	57038.230	57040.990	57044.430
	F3(-1)	57034.090	57034.090	57035.010	57036.810	57039.460	57042.900
	K	6	7	8	9	10	11
FA	F1(+1)	9.364	13.939	19.161	25.026	31.533	38.676
	F2(0)	18.262	23.056	28.519	34.644	41.424	48.852
	F3(-1)	16.817	21.755	27.405	33.748	40.770	48.458
TA	F1(+1)	57039.650	57044.230	57049.450	57055.320	57061.820	57068.960
	F2(0)	57048.550	57053.340	57058.810	57064.930	57071.710	57079.140
	F3(-1)	57047.110	57052.040	57057.700	57064.040	57071.060	57078.750
	K	12	13	14	15	16	17
FA	F1(+1)	46.448	54.842	63.848	73.456	83.655	94.433
	F2(0)	56.918	65.612	74.925	84.845	95.361	106.458
	F3(-1)	56.797	65.777	75.383	85.604	96.426	107.835
TA	F1(+1)	57076.740	57085.130	57094.140	57103.750	57113.950	57124.720
	F2(0)	57087.210	57095.900	57105.210	57115.130	57125.650	57136.750
	F3(-1)	57087.090	57096.070	57105.670	57115.890	57126.710	57138.130
	K	18	19	20	21	22	23
FA	F1(+1)	105.777	117.672	130.104	143.057	156.514	170.458
	F2(0)	118.124	130.344	143.104	156.386	170.174	184.451
	F3(-1)	119.817	132.357	145.439	159.046	173.162	187.768
TA	F1(+1)	57136.070	57147.960	57160.390	57173.350	57186.800	57200.750
	F2(0)	57148.410	57160.630	57173.390	57186.680	57200.460	57214.740
	F3(-1)	57150.110	57162.640	57175.730	57189.340	57203.450	57218.060
	K	24	25	26	27	28	29
FA	F1(+1)	184.871	199.733	215.025	230.726	246.814	263.267
	F2(0)	199.197	214.395	230.023	246.061	262.488	279.280
	F3(-1)	202.845	218.376	234.338	250.711	267.474	284.604
TA	F1(+1)	57215.160	57230.020	57245.310	57261.020	57277.100	57293.550
	F2(0)	57229.490	57244.680	57260.310	57276.350	57292.780	57309.570
	F3(-1)	57233.130	57248.660	57264.630	57281.000	57297.760	57314.890
	K	30					
FA	F1(+1)	280.062					
	F2(0)	296.415					
	F3(-1)	302.077					
TA	F1(+1)	57310.350					
	F2(0)	57326.700					
	F3(-1)	57332.370					
VA= 20		GA(BAND ORIGIN): 57082.890[1/cm]					
	K	0	1	2	3	4	5
FA	F1(+1)	-5.055	-4.097	-2.604	-1.537	2.135	5.431
	F2(0)	3.801	4.493	5.874	7.945	10.702	14.142
	F3(-1)	3.801	3.801	4.718	6.522	9.168	12.612
TA	F1(+1)	57077.840	57078.790	57080.290	57082.360	57085.030	57088.320
	F2(0)	57086.690	57087.380	57088.770	57090.840	57093.590	57097.030
	F3(-1)	57086.690	57086.690	57087.610	57089.410	57092.060	57095.500
	K	6	7	8	9	10	11
FA	F1(+1)	9.364	13.939	19.161	25.026	31.533	38.676
	F2(0)	18.262	23.056	28.519	34.644	41.424	48.852
	F3(-1)	16.817	21.755	27.405	33.748	40.770	48.458
TA	F1(+1)	57092.250	57096.830	57102.050	57107.920	57114.420	57121.570
	F2(0)	57101.150	57105.950	57111.410	57117.540	57124.320	57131.740
	F3(-1)	57099.710	57104.640	57110.300	57116.640	57123.660	57131.350
	K	12	13	14	15	16	17
FA	F1(+1)	46.448	54.842	63.848	73.456	83.655	94.433
	F2(0)	56.918	65.612	74.925	84.845	95.361	106.458
	F3(-1)	56.797	65.777	75.383	85.604	96.426	107.835
TA	F1(+1)	57129.340	57137.730	57146.740	57156.350	57166.550	57177.320
	F2(0)	57139.810	57148.500	57157.820	57167.730	57178.250	57189.350
	F3(-1)	57139.690	57148.670	57158.270	57168.500	57179.320	57190.730
	K	18	19	20	21	22	23
FA	F1(+1)	105.777	117.672	130.104	143.057	156.514	170.458
	F2(0)	118.124	130.344	143.104	156.386	170.174	184.451
	F3(-1)	119.817	132.357	145.439	159.046	173.162	187.768
1A	F1(+1)	57188.670	57200.560	57213.000	57225.950	57239.410	57253.350
	F2(0)	57201.020	57213.230	57226.000	57239.280	57253.070	57267.340
	F3(-1)	57202.710	57215.250	57228.330	57241.940	57256.050	57270.660
	K	24	25	26	27	28	29
FA	F1(+1)	184.871	199.733	215.025	230.726	246.814	263.267
	F2(0)	199.197	214.395	230.023	246.061	262.488	279.280
	F3(-1)	202.845	218.376	234.338	250.711	267.474	284.604
TA	F1(+1)	57267.760	57282.630	57297.910	57313.620	57329.700	57346.160
	F2(0)	57282.090	57297.290	57312.910	57328.950	57345.380	57362.170
	F3(-1)	57285.730	57301.270	57317.230	57333.600	57350.360	57367.500

I₂のB-Xバンド・シミュレーションコード

```

PROGRAM MAIN
*****
* PROGRAMM BY ETSURO HIRAI (94/03/27)
*
* Simulation of B-X BANDS of Iodine Molecule
*
*****

CHARACTER*40 AUSDAT, GRAFIK, RQP, FCFFILE, BDFILE, PROCFILE
INTEGER VX, VA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX

COMMON/CCHARC/AUSDAT, GRAFIK, RQP, FCFFILE, BDFILE, PROCFILE
COMMON/CPHY/CLIGHT, HPLANC, BOLTZ
COMMON/CSVXAK/VX, VA, KX, KA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX, KMIN, KMAX
COMMON/CNORM/POPDENS, PMAX, KPMIN, KPMAX, GNVX(0:100)
COMMON/CINTPQR/FLINTR, FLINTQ, FLINTP, FLINT
COMMON/CROTIVB/EROT(0:100,0:100), EVIB(0:100), PART, PARTVX, PPLIM
COMMON/CWAVE/WAVENM, WAVECM
COMMON/CTXA/TX(0:100,0:100), TA(0:100,0:100)
COMMON/CGXA/GX(0:100), GA(0:100)
COMMON/CFXA/FX(0:100,0:100), FA(0:100,0:100)
COMMON/CXBDV/BVX(0:65), DVX(0:65), TEX
COMMON/CABDV/BVA(0:65), DVA(0:65), HVA(0:65), TEA
COMMON/CFACQ/QFCF(0:5,0:67)
COMMON/COEXYZ/OEK, OEXEX, OEYEX, OEA, OEXEA, OEYEA
COMMON/CCONST/IC, LW, WLMIN, WLMAX, TVIB, TROT, ITA, ITB, NORM, PLIM
COMMON/CEQIND/IGVEQ, IGREQ, IAVEQ, IAREQ

CHAPTER 1-----
CALL I2INPUT
CALL OPENF
CHAPTER 2-----
CALL GRANDSTATE
CALL GRANDPFUNC
CHAPTER 3-----
CALL UPPERSTATE
CALL OUTP1
CHAPTER 4-----TRANSITION
CALL TRANSITION
CHAPTER 5-----OUTPUT
CALL OUTP3

STOP
END
*****
SUBROUTINE OPENF
*****
CHARACTER*40 AUSDAT, GRAFIK, RQP, FCFFILE, BDFILE, PROCFILE
COMMON/CCHARC/AUSDAT, GRAFIK, RQP, FCFFILE, BDFILE, PROCFILE
COMMON/CFACQ/QFCF(0:5,0:67)
COMMON/CXBDV/BVX(0:65), DVX(0:65), TEX
COMMON/CABDV/BVA(0:65), DVA(0:65), HVA(0:65), TEA
COMMON/CCBDR/CB(0:100), CD(0:100), CR(0:100), CG(0:100)
* , CRD(0:100), CGD(0:100)
*
C-----
OPEN(1, FILE=AUSDAT)
WRITE(1, *) 'AUSGABEDATEI:', AUSDAT

OPEN(2, FILE=GRAFIK)
C-----FRANC CONDON FACTOR DATA
OPEN(3, FILE=FCFFILE)
DO 10 , I=0, 5
DO 10 , J=1, 14
JJ=(J-1)*5

```

```

J2=4
IF(J.EQ.14) J2=2
10 READ(3,1000) (QPCF(I,J1), J1=J2, J2+J2)
1000 FORMAT( 5(1PE12.3))
C-----ROTATIONAL BAND CONST.DATA
OPEN(4, FILE=BDFILE)
DO 20 , I=0, 9
20 READ(4,2000) BVX(I), DVX(I)
DO 21 , I=0, 62
21 READ(4,2100) BVA(I), DVA(I), HVA(I)

2000 FORMAT(1PE12.7,1PE14.7)
2100 FORMAT(1PE12.7,1PE14.7,1PE15.6)
C-----DATA PROCESSING FILE
OPEN(5, FILE=PROCFILE)

RETURN
END
*****
SUBROUTINE GRANDSTATE
*****
INTEGER VX, VA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX

COMMON/CSVXAK/VX, VA, KX, KA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX, KMIN, KMAX
COMMON/CTXA/TX(0:100,0:100), TA(0:100,0:100)
COMMON/CGXA/GX(0:100), GA(0:100)
COMMON/CFXA/FX(0:100,0:100), FA(0:100,0:100)
COMMON/CXBDV/BVX(0:65), DVX(0:65), TEX
COMMON/CABDV/BVA(0:65), DVA(0:65), HVA(0:65), TEA
COMMON/COEXYZ/OEK, OEXEX, OEYEX, OEA, OEXEA, OEYEA
COMMON/CEQIND/IGVEQ, IGREQ, IAVEQ, IAREQ

C-----
* BERECHNUNG DER TERMENERGIEN
* T(V,K) : GESAMTENERGIE IN CM-1
* G(V) : VIBRATIONSTERMWERTE
* GX0 : NULLPUNKTENERGIE V''=0, OMEGA=1/2
* FX : ROTATIONSTERMWERTE
* F0 : NULLPUNKTENERGIE HYPOTHETISCHES J=0 NIVEAU
* B,D : ROTATIONSKONSTANTEN

C-----
C TERMWERTE FUER DEN X-ZUSTAND (GUELTIGKEITSBEREICH V'' < 30)
C-----

GX0=GXVALUE(0,IGVEQ)
FX0=0.

DO 10, VX=0,VXMAX

GX(VX)=GXVALUE(VX,IGVEQ) - GX0

DO 10, KX=0,KMAX

IF (IGREQ.EQ.1) THEN
FX(VX,KX)=ROT1(VX, KX, BV, DV)
ELSEIF (IGREQ.EQ.2) THEN
FX(VX,KX)=ROT3(KX, BVX(VX), DVX(VX), 0.0)
ENDIF

TX(VX,KX)= GX(VX) + FX(VX,KX)

10 CONTINUE

RETURN
END
*****
SUBROUTINE GRANDPFUNC
*****
INTEGER VX, VA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX

COMMON/CPHY/CLIGHT, HPLANC, BOLTZ
COMMON/CSVXAK/VX, VA, KX, KA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX, KMIN, KMAX
COMMON/CNORM/POPDENS, PMAX, KPMIN, KPMAX, GNVX(0:100)
COMMON/CROTIVB/EROT(0:100,0:100), EVIB(0:100), PART, PARTVX, PPLIM
COMMON/CTXA/TX(0:100,0:100), TA(0:100,0:100)
COMMON/CGXA/GX(0:100), GA(0:100)

```



```

COMMON/CFXA/FX(0:100,0:100),FA(0:100,0:100)
COMMON/CCONST/IC,LW,WLMIN,WLMAX,TVIB,TROT,ITA,ITB,NORM,PLIM
C-----
C ROTATIONS-/VIBRATIONSENERGIEN DES ELEKTRONISCHEN GRUNDZUSTANDES
C-----
PART=0.0
PARTVX=0.0

DO 30, VX=0,VXMAX

    EVIB(VX) =HPLANC*CLIGHT* GX(VX) *100
    partvx=partvx+exp(-EVIB(VX)/BOLTZ/TVIB)

DO 30, KX=0,KMAX

    EROT(VX,KX)=HPLANC*CLIGHT* FX(VX,KX) *100

PART=PART+(2*KX+1)*EXP(-EVIB(VX)/BOLTZ/TVIB)
2 *EXP(-EROT(VX,KX)/BOLTZ/TROT)

30 CONTINUE

C-----
C MAX/MIN BESETZUNG DER ROTATIONS-ZUSTÄNDE
C-----
PPLIM=PART/100*PLIM
PMAK=0.0
KPMIN=-1
KPMAX=0

DO 50, KX=0,KMAX

    POPDENS = EXP(-EVIB(0)/BOLTZ/TVIB)
1 * EXP(-EROT(0,KX)/BOLTZ/TROT)
2 * (2*KX+1)

    IF(PMAK.LT.POPDENS) THEN
        PMAK =POPDENS
        KPMAX=KX
    END IF

    IF(KPMIN.LT.0.AND.POPDENS.GT.PPLIM) KPMIN=KX

50 CONTINUE

C-----
C-----GRANDSTATE POPULATION
C-----
do 20, VX=0,VXMAX
    GNVX(VX)=EXP(-EVIB(VX)/BOLTZ/TVIB)/partvx*100.
20 continue

RETURN
END
*****
SUBROUTINE UPPERSTATE
*****
INTEGER VX,VA,VXMIN,VXMAX,VAMIN,VAMAX

COMMON/CVXVAK/VX,VA,KX,KA,VXMIN,VXMAX,VAMIN,VAMAX,KMIN,KMAX
COMMON/CTXA/TX(0:100,0:100),TA(0:100,0:100)
COMMON/CGXA/GX(0:100),GA(0:100)
COMMON/CFXA/FX(0:100,0:100),FA(0:100,0:100)
COMMON/CXBDV/BVX(0:65),DVX(0:65),TEX
COMMON/CABDV/BVA(0:65),DVA(0:65),HVA(0:65),TEA
COMMON/COEXYZE/OEX,OEXEX,OEXYX,OEA,OEXEA,OEXYA
COMMON/CRQIND/IGVEQ,IGREQ,IAVEQ,IAREQ
COMMON/CCBDR/CB(0:100),CD(0:100),CR(0:100),CG(0:100)
* ,CRD(0:100),CGD(0:100)

C-----
C TERMWERTE FUER DEN B-ZUSTAND
C-----
GA0=0.
FA0=0.

DO 14, VA=0,VAMAX

    GA(VA)=GAVALUE(VA,IAVEQ)

DO 14, KA=0,KMAX

```

```

IF (IAREQ.EQ.1) THEN
    FA(VA,KA)=ROT2(VA,KA,BV,DV,HV)
ELSEIF (IAREQ.EQ.2) THEN
    FA(VA,KA)=ROT3(KA,BVA(VA),DVA(VA),HVA(VA))
ENDIF

TA(VA,KA)= GA(VA) + FA(VA,KA)

14 CONTINUE

RETURN
END
*****
SUBROUTINE OUTP1
*****
INTEGER VX,VA,VXMIN,VXMAX,VAMIN,VAMAX

COMMON/CVXVAK/VX,VA,KX,KA,VXMIN,VXMAX,VAMIN,VAMAX,KMIN,KMAX
COMMON/CTXA/TX(0:100,0:100),TA(0:100,0:100)
COMMON/CGXA/GX(0:100),GA(0:100)
COMMON/CFXA/FX(0:100,0:100),FA(0:100,0:100)
COMMON/CXBDV/BVX(0:65),DVX(0:65),TEX
COMMON/CABDV/BVA(0:65),DVA(0:65),HVA(0:65),TEA
COMMON/CCONST/IC,LW,WLMIN,WLMAX,TVIB,TROT,ITA,ITB,NORM,PLIM
COMMON/CRQIND/IGVEQ,IGREQ,IAVEQ,IAREQ

C-----
C AUSGABE DER TERMENERGIEN
C-----
IF(ITA.EQ.0) RETURN

C-----
C-----GRANDSTATE OUTPUT
C-----
iprint=6
if(mod(kmax+1,iprint).eq.0) then
    jj=(kmax+1)/iprint
else
    jj=(kmax+1)/iprint+1
endif

do 11, vx=0,vxmax

    IF (IGREQ.EQ.1) THEN
        RLEVEL0=ROT1(VX,0,BV,DV)
    ELSEIF (IGREQ.EQ.2) THEN
        BV=BVX(VX)
        DV=DVX(VX)
    ENDIF

    GXK0 = GXVALUE(VX,IGVEQ)
    WRITE(1,3000) ' VX=',VX,'GX(BAND ORIGIN):',GX(VX),' [1/cm]'
    WRITE(1,3001) '          GX + GX0:',GXK0,' [1/cm]'
    WRITE(1,3002) '          BV:',BV,' [1/cm]'
    WRITE(1,3002) '          DV:',DV,' [1/cm]'

do 12, j=1,jj
    j1=(j-1)*iprint
    j2=j *iprint-1
    if(j.eq.jj) j2=kmax
    WRITE(1,3020) ' K ',(K,j1,j2)
    WRITE(1,3021) ' FX ',(fx(vx,k),k=j1,j2)
    WRITE(1,3021) ' TX ',(tx(vx,k),k=j1,j2)

12 continue
11 continue

C-----
C-----UPPERSTATE OUTPUT
C-----
do 15, va=0,vamax

    IF (IAREQ.EQ.1) THEN
        RLEVEL0=ROT2(VA,0,BV,DV,HV)
    ELSEIF (IAREQ.EQ.2) THEN
        BV=BVA(VA)
        DV=DVA(VA)
        HV=HVA(VA)
    ENDIF

    write(1,3000) ' VA=',VA,'GA(BAND ORIGIN):',GA(VA),' [1/cm]'
    WRITE(1,3002) '          BV:',BV,' [1/cm]'
    WRITE(1,3002) '          DV:',DV,' [1/cm]'
    WRITE(1,3002) '          HV:',HV,' [1/cm]'

do 16, j=1,jj
    j1=(j-1)*iprint
    j2=j *iprint-1

```



```

      if(j.eq.jj) j2=kmax
      write(1,3020) ' K ', ( k ,k=j1,j2)
      write(1,3021) ' FA ', (fa(va,k),k=j1,j2)
      write(1,3021) ' TA ', (ta(va,k),k=j1,j2)

16 continue
15 continue
C-----FORMAT
3000 FORMAT(A4,I3,5X,A16,F15.3 ,A7)
3001 FORMAT(A28, F15.3 ,A7)
3002 FORMAT(A28, 1PE15.7,A7)
3020 FORMAT(a9,6(4x,i3,3x))
3021 FORMAT(a9,6f10.3)
      RETURN
      END

*****
SUBROUTINE TRANSITION
*****
CHARACTER*40 AUSDAT, GRAFIK, RQP, FCFFILE, BDFILE, PROCFILE
INTEGER VX, VA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX

COMMON/CCHARC/AUSDAT, GRAFIK, RQP, FCFFILE, BDFILE, PROCFILE
COMMON/CPHY/CLIGHT, HPLANC, BOLTZ
COMMON/CSVXAK/VX, VA, KX, KA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX, KMIN, KMAX
COMMON/CHORM/POPDENS, PMAX, KPMIN, KPMAX, GNVX(0:100)
COMMON/CINTPQR/FLINTR, FLINTQ, FLINTP, FLINT
COMMON/CROTIV/EROT(0:100,0:100), EVIB(0:100), PART, PARTVX, PPLIM
COMMON/CWAVE/WAVENM, WAVECM
COMMON/CTXA/TX(0:100,0:100), TA(0:100,0:100)
COMMON/CGXA/GX(0:100), GA(0:100)
COMMON/CFXA/FX(0:100,0:100), FA(0:100,0:100)
COMMON/CFAC/FCF(0:5,0:67)
COMMON/CCONST/IC, LW, WLMIN, WLMAX, TVIB, TROT, ITA, ITB, NORM, PLIM
COMMON/CHL/HLRQ21, HLRP31, HLPQ12, HLRQ32, HLPQ23, HLP313, HLTR31, HLP313

C-----
* BERECHNUNG DER RELATIVEN INTENSITAETEN DER ANREGUNGSUEBERGANGS
* QFCF:FRANCK-CONDON-FAKTOREN
* HL:HOENL-LONDON FAKTOREN
C-----
      if(itb.eq.0) return
      IC=0
2      FORMAT(' I2 B-X Band ' /
1 ' ---Quantum Number--- ---Wave Length--- ' /
2 ' (VX JX) (VA JA) W(nm) W(1/cm) Intensity Name')

      WRITE(1,2)

      DO 44, VX=VXMIN, VXMAX
      WRITE(*,9999) ' NOW CALCULATING VX=', VX
9999 FORMAT(A25,I3)

      DO 44, VA=VAMIN, VAMAX
      WRITE(*,9999) ' VA= ', VA
      write(1,*) ' '
      DO 43, KX=KMIN, KMAX
      KA1=KX-1
      KA2=KX+1
      IF(KA1.LT.0) KA1=0
      IF(KA2.GT.KMAX) KA2=KMAX
      DO 42, KA=KA1, KA2

C      write(*,*) kx, ka, ka1, ka2

C-----SPECTRA INTENSITY
      POPDENS = EXP(-EVIB(VX) /BOLTZ /TVIB)
      * EXP(-EROT(VX,KX)/BOLTZ /TROT)
      * (2* KX +1)
      * /PART

      CALL HLPACT(KX,HLR,HLQ,HLP)

C-----RECHNUNG DER UEBERGANGSWELLENLAENGEN DER RO-VI NIVEAUS IN NM
      WAVECM= TA(VA,KA)-TX(VX,KX)
      IF(WAVECM.GT.0.0) WAVENM= (1 /WAVECM )*10**7
C-----LINE SELECTION
      CALL TRUEL(INDTR)
      IF(INDTR.EQ.0) GOTO 41
C-----

```

```

C      WRITE(*,*) POPDENS, QPCF(VX,VA), HLR,HLQ,HLP

      FLINT =POPDENS*(TA(VA,KA)-TX(VX,KX))
      * QPCF(VX,VA)
      * / (2*KX+1)

      IF(NORM.EQ.1) FLINT=FLINT*
2      EXP(-( 2*(TA(VA,KA)-TX(VX,KX)-51722)/123.)*2*LOG(2))

      IF ((KA-KX).EQ.1) GOTO 51
      IF ((KA-KX).EQ.-1) GOTO 53
C-----R-Branch
51      FLINT=FLINT*HLR
      RQP=' R-----'

      GOTO 54
C-----P-Branch
53      FLINT=FLINT*HLP
      RQP=' -----P'

C-----PRINT OUT
54      CALL OUTP2(FLINT)

41 CONTINUE
42 CONTINUE
43 CONTINUE
44 CONTINUE
      RETURN
      END

*****
SUBROUTINE TRUEL(INDTR)
*****
CHARACTER*40 AUSDAT, GRAFIK, RQP, FCFFILE, BDFILE, PROCFILE
INTEGER VX, VA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX

COMMON/CCHARC/AUSDAT, GRAFIK, RQP, FCFFILE, BDFILE, PROCFILE
COMMON/CSVXAK/VX, VA, KX, KA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX, KMIN, KMAX
COMMON/CWAVE/WAVENM, WAVECM
COMMON/CCONST/IC, LW, WLMIN, WLMAX, TVIB, TROT, ITA, ITB, NORM, PLIM

C-----WELLENLAENGENSELEKTION, AUSWAHLREGELN, BILDSCHIRM-/DRUCKERAUSGABE
C-----
      INDTR=0

      IF ( WAVENM.LT.WLMIN.OR.WAVENM.GT.WLMAX ) RETURN
      IF ( ITB.EQ.0 ) RETURN

C-----SELECTION RULES OF Electronic Transitions
Condition 1--- quantum no.k
      IF ( ABS(KX-KA).GT.1 ) RETURN
Condition 2--- Q-branches are missing
      IF ( KX.EQ.KA ) RETURN

      INDTR=1

      RETURN
      END

*****
SUBROUTINE OUTP2(FLINT)
*****
CHARACTER*40 AUSDAT, GRAFIK, RQP, FCFFILE, BDFILE, PROCFILE
INTEGER VX, VA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX

COMMON/CCHARC/AUSDAT, GRAFIK, RQP, FCFFILE, BDFILE, PROCFILE
COMMON/CSVXAK/VX, VA, KX, KA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX, KMIN, KMAX
COMMON/CWAVE/WAVENM, WAVECM
COMMON/CCONST/IC, LW, WLMIN, WLMAX, TVIB, TROT, ITA, ITB, NORM, PLIM

C-----
      IC=IC+1
      WRITE(1,1000) ' (' ,VX,KX,')',
2      ' (' ,VA,KA,')',
3      WAVENM, WAVECM, FLINT, RQP, ' (' ,KX,')'
2      ,VA,KA, WAVECM, FLINT
C-----FORMAT
1000 FORMAT(A2,2I3,A1,1X,A1,2I3,A1,F9.4,F10.3
1 ,1PE11.3,A10,A1,I3,A1)
1010 FORMAT(I6,4I4,F11.4,1PE12.4)

```



```

RETURN
END
*****
SUBROUTINE HLPACT(N,HLR,HLQ,HLP)
*****
COMMON/CHL/HLRQ21,HLRP31,HLRQ12,HLRQ32,HLRQ23,HLRP13,HLTR31,HLNP13
C-----
C   Eq. by G.Herzberg
C   Molecular Spectra & Molecular Structure p208 (1950)
C-----
      HLR   =FLOAT(N+1)
      HLP   =FLOAT(N)
      HLQ   =0.0
RETURN
END
*****
SUBROUTINE OUTP3
*****
CHARACTER*40 AUSDAT, GRAFIK, RQP, FCFFILE, BDFILE, PROCFILE
INTEGER VX, VA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX

COMMON/CCHAR/AUSDAT, GRAFIK, RQP, FCFFILE, BDFILE, PROCFILE
COMMON/CPHY/CLIGHT, HPLANC, BOLTZ
COMMON/CSVAK/VX, VA, KX, KA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX, KMIN, KMAX
COMMON/CNORM/POPDENS, PMAX, KPMIN, KPMAX, GNVX(0:100)
COMMON/CINTPQR/PLINTR, PLINTQ, PLINTP, PLINT
COMMON/CROTVIB/EROT(0:100,0:100), EVIB(0:100), PART, PARTVX, PPLIM
COMMON/CWAVE/WAVENM, WAVECM
COMMON/CCONST/IC, LW, WLMIN, WLMAX, TVIB, TROT, ITA, ITB, NORM, PLIM
COMMON/CEQIND/IGVEQ, IGREQ, IAVEQ, IAREQ
C-----
      write (1,*)
      * ' v ', 'SCHWINGUNGSBESETZUNG[%] '
      DO 10, I=0, VXMAX
10    WRITE(1, '(I4,F10.2)') I, GNVX(I)

      WRITE(1, '(A,F7.1)') ' PARTITION FUNCTION( Zvib=Zrot ) : ', PART
      WRITE(1, '(A,F7.1)') ' PARTITION FUNCTION( Zvib ) : ', PARTVX
      PARTJ=PART/PARTVX
      WRITE(1, '(A,F7.1)') ' PARTITION FUNCTION( Zrot ) : ', PARTJ

      IF (KPMIN.EQ.0) THEN
        WRITE(1, '(A)') ' BESETZUNGSGRENZE NICHT ERREICHT ! '
        GOTO 91
      END IF
      WRITE(1, '(A,I3 ,F7.3,A)') ' MIN. ROTATIONSBESETZUNG: J= ', KPMIN,
      * PPLIM, '%'
C91  WRITE(1, '(A,I3 ,F5.1,A)') ' MAX. ROTATIONSBESETZUNG: J= ', KPMAX,
C    * GNMAX/PART*100, '%'
C-----Wave Length Region
      WRITE(1, '(A,F7.2,A)') ' MIN. WELLENLAENGE (NM): ', WLMIN, 'NM'
      WRITE(1, '(A,F7.2,A)') ' MAX. WELLENLAENGE (NM): ', WLMAX, 'NM'
C-----Quantum Number
      WRITE(1, '(A,F7.0,A)') ' VIBRATIONSTEMPERATUR= ', TVIB, ' K'
      WRITE(1, '(A,F7.0,A)') ' ROTATIONSTEMPERATUR= ', TROT, ' K'
      WRITE(1, '(A,I3,A,I3)') ' VXMIN= ', VXMIN, ' VXMAX= ', VXMAX
      WRITE(1, '(A,I3,A,I3)') ' VAMIN= ', VAMIN, ' VAMAX= ', VAMAX
      WRITE(1, '(A,I4,A,I4)') ' KMIN= ', KMIN, ' KMAX= ', KMAX
      WRITE(1,*) ' '
C-----Total Number of Spectra
      WRITE(2,1001) IC
      WRITE(2,1002) WLMIN, WLMAX, TVIB, TROT
C-----Term Value Formulae
      WRITE(1,1000) ' IGVEQ = ', IGVEQ
      IF (IGVEQ.EQ.1) WRITE(1,*) ' Eq. by R.J.ReLoy is used. '
      WRITE(1,1000) ' IGREQ = ', IGREQ
      IF (IGREQ.EQ.1) WRITE(1,*) ' Eq. by R.J.ReLoy is used. '
      WRITE(1,1000) ' IAVEQ = ', IAVEQ
      IF (IAVEQ.EQ.1) WRITE(1,*) ' Eq. by R.F.Barrow is used. '
      WRITE(1,1000) ' IAREQ = ', IAREQ
      IF (IAREQ.EQ.1) WRITE(1,*) ' Eq. by J.D.Brown is used. '
1000  FORMAT(A10,I1)
1001  FORMAT(I7)
1002  FORMAT(4F10.3)
RETURN
END

```

```

*****
FUNCTION GXVALUE(I,IEQ)
*****
      IF(IEQ.EQ.1) GOTO 100
      IF(IEQ.EQ.2) GOTO 200
C-----
C   Robert J. LeRoy, J. Chem. Phys., 52(5), 2683-2689 (1970)
C   &
C   R.D.Verma, J. Chem. Phys., 32(3), 738-749 (1960)
C-----
100  GXVALUE= 214.5481 * (FLOAT(I)+0.5)
      * -0.616259 * (FLOAT(I)+0.5)**2
      * +7.507e-5 * (FLOAT(I)+0.5)**3
      * -1.263643e-4 * (FLOAT(I)+0.5)**4
      * +6.198129e-6 * (FLOAT(I)+0.5)**5
      * -2.0255975e-7 * (FLOAT(I)+0.5)**6
      * +3.9662824e-9 * (FLOAT(I)+0.5)**7
      * -4.6346554e-11 * (FLOAT(I)+0.5)**8
      * +2.9330755e-13 * (FLOAT(I)+0.5)**9
      * -7.61000e-16 * (FLOAT(I)+0.5)**10
      IF(I.LE.82) RETURN

      GXVALUE= 214.5481 * (FLOAT(82)+0.5)
      * -0.616259 * (FLOAT(82)+0.5)**2
      * +7.507e-5 * (FLOAT(82)+0.5)**3
      * -1.263643e-4 * (FLOAT(82)+0.5)**4
      * +6.198129e-6 * (FLOAT(82)+0.5)**5
      * -2.0255975e-7 * (FLOAT(82)+0.5)**6
      * +3.9662824e-9 * (FLOAT(82)+0.5)**7
      * -4.6346554e-11 * (FLOAT(82)+0.5)**8
      * +2.9330755e-13 * (FLOAT(82)+0.5)**9
      * -7.61000e-16 * (FLOAT(82)+0.5)**10

      GXVALUE=GXVALUE+46.60
      IF(I.EQ.83) RETURN
      GXVALUE=GXVALUE+43.70
      IF(I.EQ.84) RETURN
      GXVALUE=GXVALUE+40.50
      IF(I.EQ.85) RETURN
      GXVALUE=GXVALUE+37.4
      IF(I.EQ.86) RETURN
      GXVALUE=GXVALUE+34.3
      IF(I.EQ.87) RETURN
      GXVALUE=GXVALUE+31.5
      IF(I.EQ.88) RETURN
      GXVALUE=GXVALUE+28.5
      IF(I.EQ.89) RETURN
      GXVALUE=GXVALUE+25.6
      IF(I.EQ.90) RETURN
      GXVALUE=GXVALUE+23.0
      IF(I.EQ.91) RETURN
      GXVALUE=GXVALUE+20.6
      IF(I.EQ.92) RETURN
      GXVALUE=GXVALUE+18.4
      IF(I.EQ.93) RETURN
      GXVALUE=GXVALUE+16.4
      IF(I.EQ.94) RETURN
      GXVALUE=GXVALUE+14.8
      IF(I.EQ.95) RETURN
      GXVALUE=GXVALUE+13.5
      IF(I.EQ.96) RETURN
      GXVALUE=GXVALUE+12.4
      IF(I.EQ.97) RETURN
      GXVALUE=GXVALUE+11.4
      IF(I.EQ.98) RETURN
      GXVALUE=GXVALUE+10.5
      IF(I.EQ.99) RETURN
      GXVALUE=GXVALUE+9.8
      IF(I.EQ.100) RETURN
      GXVALUE=GXVALUE+9.0
      IF(I.EQ.101) RETURN
      GXVALUE=GXVALUE+8.5
      IF(I.EQ.102) RETURN
      GXVALUE=GXVALUE+8.0
      IF(I.EQ.103) RETURN
      GXVALUE=GXVALUE+7.4

```



```

IF(I.EQ.104) RETURN
GXVALUE=GXVALUE+6.7
IF(I.EQ.105) RETURN
GXVALUE=GXVALUE+6.2
IF(I.EQ.106) RETURN
GXVALUE=GXVALUE+5.5
IF(I.EQ.107) RETURN
GXVALUE=GXVALUE+5.0
IF(I.EQ.108) RETURN
GXVALUE=GXVALUE+4.5
IF(I.EQ.109) RETURN
GXVALUE=GXVALUE+3.9
IF(I.EQ.110) RETURN
GXVALUE=GXVALUE+3.3
IF(I.EQ.111) RETURN
GXVALUE=GXVALUE+2.6
IF(I.EQ.112) RETURN
GXVALUE=GXVALUE+2.0
IF(I.EQ.113) RETURN
GXVALUE=GXVALUE+1.4
IF(I.EQ.114) RETURN
GXVALUE=GXVALUE+0.5

```

RETURN

```

C-----
C      Data of P.Luc
C      J.Mol.Spectroscopy 80,41-55 (1980)
C-----
200  IF(I.EQ.0) GXVALUE=      0.0
      IF(I.EQ.1) GXVALUE=    213.3006
      IF(I.EQ.2) GXVALUE=    425.3733
      IF(I.EQ.3) GXVALUE=    636.2102
      IF(I.EQ.4) GXVALUE=    845.8034
      IF(I.EQ.5) GXVALUE=   1054.1457
      IF(I.EQ.6) GXVALUE=   1261.2279
      IF(I.EQ.7) GXVALUE=   1476.04114
      IF(I.EQ.8) GXVALUE=   1671.5786
      IF(I.EQ.9) GXVALUE=   1874.8283
      RETURN
      END

```

FUNCTION GAVALUE(I,IEQ)

```

      IF(IEQ.EQ.1) GOTO 100
      IF(IEQ.EQ.2) GOTO 200

```

```

C-----
C      Data of R.F.Barrow et al
C      J.Chem.Soc.Faraday Trans.II,684-700 (1973)
C-----
100  IF(I.EQ.0) GAVALUE=      62.66
      IF(I.EQ.1) GAVALUE=    186.82
      IF(I.EQ.2) GAVALUE=    309.44
      IF(I.EQ.3) GAVALUE=    430.49
      IF(I.EQ.4) GAVALUE=    549.97
      IF(I.EQ.5) GAVALUE=    667.88
      IF(I.EQ.6) GAVALUE=    784.18
      IF(I.EQ.7) GAVALUE=    898.83
      IF(I.EQ.8) GAVALUE=   1011.82
      IF(I.EQ.9) GAVALUE=   1123.17
      IF(I.EQ.10) GAVALUE=  1232.80
      IF(I.EQ.11) GAVALUE=  1340.72
      IF(I.EQ.12) GAVALUE=  1446.90
      IF(I.EQ.13) GAVALUE=  1551.33
      IF(I.EQ.14) GAVALUE=  1653.97
      IF(I.EQ.15) GAVALUE=  1754.80
      IF(I.EQ.16) GAVALUE=  1853.81
      IF(I.EQ.17) GAVALUE=  1950.96
      IF(I.EQ.18) GAVALUE=  2046.22
      IF(I.EQ.19) GAVALUE=  2139.61
      IF(I.EQ.20) GAVALUE=  2231.06
      IF(I.EQ.21) GAVALUE=  2320.58
      IF(I.EQ.22) GAVALUE=  2408.13
      IF(I.EQ.23) GAVALUE=  2493.70
      IF(I.EQ.24) GAVALUE=  2577.28
      IF(I.EQ.25) GAVALUE=  2658.83
      IF(I.EQ.26) GAVALUE=  2738.35
      IF(I.EQ.27) GAVALUE=  2815.82
      IF(I.EQ.28) GAVALUE=  2891.23
      IF(I.EQ.29) GAVALUE=  2964.57
      IF(I.EQ.30) GAVALUE=  3035.82

```

```

IF(I.EQ.31) GAVALUE=    3104.98
IF(I.EQ.32) GAVALUE=    3172.04
IF(I.EQ.33) GAVALUE=    3236.99
IF(I.EQ.34) GAVALUE=    3299.83
IF(I.EQ.35) GAVALUE=    3360.55
IF(I.EQ.36) GAVALUE=    3419.14
IF(I.EQ.37) GAVALUE=    3475.69
IF(I.EQ.38) GAVALUE=    3530.16
IF(I.EQ.39) GAVALUE=    3582.55
IF(I.EQ.40) GAVALUE=    3632.89
IF(I.EQ.41) GAVALUE=    3681.18
IF(I.EQ.42) GAVALUE=    3727.45
IF(I.EQ.43) GAVALUE=    3771.72
IF(I.EQ.44) GAVALUE=    3814.02
IF(I.EQ.45) GAVALUE=    3854.41
IF(I.EQ.46) GAVALUE=    3892.86
IF(I.EQ.47) GAVALUE=    3929.47
IF(I.EQ.48) GAVALUE=    3964.25
IF(I.EQ.49) GAVALUE=    3997.22
IF(I.EQ.50) GAVALUE=    4028.41
IF(I.EQ.51) GAVALUE=    4057.89
IF(I.EQ.52) GAVALUE=    4085.72
IF(I.EQ.53) GAVALUE=    4111.90
IF(I.EQ.54) GAVALUE=    4136.51
IF(I.EQ.55) GAVALUE=    4159.61
IF(I.EQ.56) GAVALUE=    4181.19
IF(I.EQ.57) GAVALUE=    4201.33
IF(I.EQ.58) GAVALUE=    4220.05
IF(I.EQ.59) GAVALUE=    4237.41
IF(I.EQ.60) GAVALUE=    4253.47
IF(I.EQ.61) GAVALUE=    4268.28
IF(I.EQ.62) GAVALUE=    4281.86
IF(I.EQ.63) GAVALUE=    4294.27
IF(I.EQ.64) GAVALUE=    4305.60
IF(I.EQ.65) GAVALUE=    4315.88
IF(I.EQ.66) GAVALUE=    4325.13
IF(I.EQ.67) GAVALUE=    4333.44
IF(I.EQ.68) GAVALUE=    4340.85
IF(I.EQ.69) GAVALUE=    4347.41
IF(I.EQ.70) GAVALUE=    4353.18
IF(I.EQ.71) GAVALUE=    4358.23
IF(I.EQ.72) GAVALUE=    4362.61
IF(I.EQ.73) GAVALUE=    4366.37
IF(I.EQ.74) GAVALUE=    4369.56
IF(I.EQ.75) GAVALUE=    4372.25
IF(I.EQ.76) GAVALUE=    4374.47
IF(I.EQ.77) GAVALUE=    4376.27
IF(I.EQ.78) GAVALUE=    4377.72
IF(I.EQ.79) GAVALUE=    4378.84
IF(I.EQ.80) GAVALUE=    4379.69
IF(I.EQ.81) GAVALUE=    4380.31
IF(I.EQ.82) GAVALUE=    4380.74
IF(I.EQ.83) GAVALUE=    4381.01
IF(I.EQ.84) GAVALUE=    4381.17
IF(I.EQ.85) GAVALUE=    4381.25

```

GAVALUE=GAVALUE+15661.889
RETURN

```

C-----
C      Data of P.Luc
C      J.Mol.Spectroscopy,80,41-55 (1980)
C-----
200  IF(I.EQ.0) GAVALUE=    15724.5894
      IF(I.EQ.1) GAVALUE=    15848.7476
      IF(I.EQ.2) GAVALUE=    15971.3668
      IF(I.EQ.3) GAVALUE=    16092.4368
      IF(I.EQ.4) GAVALUE=    16211.9334
      IF(I.EQ.5) GAVALUE=    16329.8365
      IF(I.EQ.6) GAVALUE=    16446.1265
      IF(I.EQ.7) GAVALUE=    16560.7843
      IF(I.EQ.8) GAVALUE=    16673.7866
      IF(I.EQ.9) GAVALUE=    16785.1140
      IF(I.EQ.10) GAVALUE=   16894.7443
      IF(I.EQ.11) GAVALUE=   17002.6565
      IF(I.EQ.12) GAVALUE=   17108.8275
      IF(I.EQ.13) GAVALUE=   17213.2364
      IF(I.EQ.14) GAVALUE=   17315.8600
      IF(I.EQ.15) GAVALUE=   17416.6768
      IF(I.EQ.16) GAVALUE=   17515.6645
      IF(I.EQ.17) GAVALUE=   17612.7997

```



```

IF(I.EQ.18) GAVALUE= 17708.0619
IF(I.EQ.19) GAVALUE= 17801.4283
IF(I.EQ.20) GAVALUE= 17892.8777
IF(I.EQ.21) GAVALUE= 17982.3892
IF(I.EQ.22) GAVALUE= 18069.9423
IF(I.EQ.23) GAVALUE= 18155.5174
IF(I.EQ.24) GAVALUE= 18239.0953
IF(I.EQ.25) GAVALUE= 18320.6579
IF(I.EQ.26) GAVALUE= 18400.1887
IF(I.EQ.27) GAVALUE= 18477.6718
IF(I.EQ.28) GAVALUE= 18553.0929
IF(I.EQ.29) GAVALUE= 18626.4388
IF(I.EQ.30) GAVALUE= 18697.6996
IF(I.EQ.31) GAVALUE= 18766.8672
IF(I.EQ.32) GAVALUE= 18833.9309
IF(I.EQ.33) GAVALUE= 18898.8899
IF(I.EQ.34) GAVALUE= 18961.7422
IF(I.EQ.35) GAVALUE= 19022.4879
IF(I.EQ.36) GAVALUE= 19081.1306
IF(I.EQ.37) GAVALUE= 19137.6777
IF(I.EQ.38) GAVALUE= 19192.1382
IF(I.EQ.39) GAVALUE= 19244.5247
IF(I.EQ.40) GAVALUE= 19294.8524
IF(I.EQ.41) GAVALUE= 19343.1405
IF(I.EQ.42) GAVALUE= 19389.4099
IF(I.EQ.43) GAVALUE= 19433.6851
IF(I.EQ.44) GAVALUE= 19475.9912
IF(I.EQ.45) GAVALUE= 19516.3611
IF(I.EQ.46) GAVALUE= 19554.8256
IF(I.EQ.47) GAVALUE= 19591.4197
IF(I.EQ.48) GAVALUE= 19626.1797
IF(I.EQ.49) GAVALUE= 19659.1449
IF(I.EQ.50) GAVALUE= 19690.3546
IF(I.EQ.51) GAVALUE= 19719.8506
IF(I.EQ.52) GAVALUE= 19747.6750
IF(I.EQ.53) GAVALUE= 19773.8703
IF(I.EQ.54) GAVALUE= 19798.4824
IF(I.EQ.55) GAVALUE= 19821.5542
IF(I.EQ.56) GAVALUE= 19843.1311
IF(I.EQ.57) GAVALUE= 19863.2585
IF(I.EQ.58) GAVALUE= 19881.9834
IF(I.EQ.59) GAVALUE= 19899.3523
IF(I.EQ.60) GAVALUE= 19915.4127
IF(I.EQ.61) GAVALUE= 19930.2139
IF(I.EQ.62) GAVALUE= 19943.8081
RETURN
END
*****
FUNCTION ROT1(NV,NJ,BV,DV)
*****
C Rotational Term Value of X-State
C
C R.J.ReLoy, J. Chem. Phys., 52(5), 2683-2689 (1970)
C-----
RV=FLOAT(NV)
RJ=FLOAT(NJ)

BV=3.7395E-2-1.2435E-4*(RV+0.5)
* +4.498E-7*(RV+0.5)**2
* -1.482E-8*(RV+0.5)**3
* -3.64E-11*(RV+0.5)**4
DV=4.54E-9 +1.7E-11*(RV+0.5)
* +7E-12*(RV+0.5)**2
ROT1=BV*RJ*(RJ+1.)-DV*RJ*RJ*(RJ+1.)*(RJ+1.)

RETURN
END
*****
FUNCTION ROT2(NV,NJ,BV,DV,HV)
*****
C Equation by J.D.Brown, G.Burns and R.J.ReLoy
C Can.J.Phys., vol.51, 1664-1677 (1973)
C-----
RV=FLOAT(NV)
RJ=FLOAT(NJ)

BV=2.904741E-2 -1.833819E-4*(RV+0.5)
* +3.303907E-6*(RV+0.5)**2
* -2.301969E-7*(RV+0.5)**3

```

```

* +4.432396E-9*(RV+0.5)**4
* -4.309644E-11*(RV+0.5)**5
* +1.724098E-13*(RV+0.5)**6
DV=1E-9/(0.40294-3.1913E-3*(RV+0.5)
* -1.320000E-4*(RV+0.5)**2
* +5.027000E-6*(RV+0.5)**3
* -1.040600E-7*(RV+0.5)**4
* +1.138600E-9*(RV+0.5)**5
* -4.936000E-12*(RV+0.5)**6)**2
HV=-1E-15/(0.7513+1.15549E-2*(RV+0.5)
* -3.560710E-3*(RV+0.5)**2
* +1.807046E-4*(RV+0.5)**3
* -4.559987E-6*(RV+0.5)**4
* +6.202624E-8*(RV+0.5)**5
* -4.347740E-10*(RV+0.5)**6
* +1.232020E-12*(RV+0.5)**7)**4

ROT2=BV*RJ*(RJ+1.)-DV*(RJ*(RJ+1.))**2+HV*(RJ*(RJ+1.))**3

RETURN
END
*****
FUNCTION ROT3(NJ,BV,DV,HV)
*****
C Equation by P.Luc
C J.Mol.Spectroscopy 80,41-55 (1980)
C-----
RJ=FLOAT(NJ)

ROT3=BV*RJ*(RJ+1.)-DV*(RJ*(RJ+1.))**2+HV*(RJ*(RJ+1.))**3

RETURN
END
*****
FUNCTION ROT4(I)
*****
ROT4 = I

RETURN
END

```



```

*****
BLOCK DATA
*****
CHARACTER*40 AUSDAT, GRAFIK, RQP, PCFFILE, BDFILE, PROCFILE
INTEGER VX, VA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX
COMMON/CCHARC/AUSDAT, GRAFIK, RQP, PCFFILE, BDFILE, PROCFILE
COMMON/CCONST/IC, LW, WLMIN, WLMAX, TVIB, TROT, ITA, ITB, NORM, PLIM
COMMON/CPHY/CLIGHT, HPLANC, BOLTZ
COMMON/CVXVAK/VX, VA, KX, KA, VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX, KMIN, KMAX
COMMON/CEQIND/IGVEQ, IREQ, IAVEQ, IAREQ

DATA VXMIN, VXMAX, VAMIN, VAMAX, KMIN, KMAX
1 /0 ,0 ,13 ,13 ,0 ,30 /

DATA CLIGHT ,HPLANC ,BOLTZ
1 /2.99792458E8 ,6.6260755E-34,1.380658E-23/

C-----PRINT INDEX
C ITA=0 ; Term Values are not printed
C ITA=1 ; are printed
C ITB=0 ; Nothing are printed in File
C ITB=1 ; Singlet Lines are printed in File
DATA ITA,ITB/0,1/

C-----INDEX
DATA WLMIN,WLMAX/175.,230.0/
DATA TVIB,TROT/300.,300./
DATA PLIM,NORM/.01,0/

C-----DATA FILE
DATA AUSDAT/ 'D:\LIF\I2\DATA\I2_TEST.DAT' /
DATA GRAFIK/ 'D:\I2_BX.GRF' /
DATA PROCFILE/'D:\I2_BX.WKF' /
DATA PCFFILE/ 'D:\LIF\I2\I2PCF.DAT' /
DATA BDFILE / 'D:\LIF\I2\BDCONST.DAT' /

C-----TERM VALUE EQ. SELECTION
DATA IGVEQ,IREQ,IAVEQ,IAREQ/2,2,2,2/

END

```

I₂のB-Xバンドにおけるブランチ

```

AUSGABEDATEI:D:\LIF\I2\I2_TEST.dat
I2 B-X Band
---Quantum Number--- ---Wave Length---
(VX JX) (VA JA) W(nm) W(1/cm) Intensity Name

( 0 0) ( 0 1) 635.9443 15724.650 3.656E-06 R-----[ 0]
( 0 1) ( 0 0) 635.9496 15724.520 3.655E-06 -----P[ 1]

( 0 0) ( 1 1) 630.9623 15848.810 5.617E-05 R-----[ 0]
( 0 1) ( 1 0) 630.9676 15848.670 5.615E-05 -----P[ 1]

( 0 0) ( 2 1) 626.1182 15971.420 4.376E-04 R-----[ 0]
( 0 1) ( 2 0) 626.1234 15971.290 4.375E-04 -----P[ 1]

( 0 0) ( 3 1) 621.4078 16092.490 2.308E-03 R-----[ 0]
( 0 1) ( 3 0) 621.4128 16092.360 2.307E-03 -----P[ 1]

( 0 0) ( 4 1) 616.8274 16211.990 9.293E-03 R-----[ 0]
( 0 1) ( 4 0) 616.8324 16211.860 9.290E-03 -----P[ 1]

( 0 0) ( 5 1) 612.3738 16329.890 3.053E-02 R-----[ 0]
( 0 1) ( 5 0) 612.3788 16329.760 3.052E-02 -----P[ 1]

( 0 0) ( 6 1) 608.0438 16446.180 8.547E-02 R-----[ 0]
( 0 1) ( 6 0) 608.0486 16446.050 8.544E-02 -----P[ 1]

( 0 0) ( 7 1) 603.8341 16560.840 2.098E-01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 7 0) 603.8388 16560.710 2.097E-01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 8 1) 599.7418 16673.840 4.615E-01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 8 0) 599.7465 16673.710 4.613E-01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 9 1) 595.7641 16785.170 9.245E-01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 9 0) 595.7687 16785.040 9.242E-01 -----P[ 1]

( 0 0) (10 1) 591.8981 16894.800 1.710E+00 R-----[ 0]
( 0 1) (10 0) 591.9026 16894.670 1.709E+00 -----P[ 1]

( 0 0) (11 1) 588.1415 17002.710 2.949E+00 R-----[ 0]
( 0 1) (11 0) 588.1459 17002.580 2.948E+00 -----P[ 1]

( 0 0) (12 1) 584.4917 17108.880 4.783E+00 R-----[ 0]
( 0 1) (12 0) 584.4961 17108.750 4.781E+00 -----P[ 1]

( 0 0) (13 1) 580.9465 17213.290 7.349E+00 R-----[ 0]
( 0 1) (13 0) 580.9508 17213.160 7.347E+00 -----P[ 1]

( 0 0) (14 1) 577.5035 17315.910 1.076E+01 R-----[ 0]
( 0 1) (14 0) 577.5078 17315.790 1.075E+01 -----P[ 1]

( 0 0) (15 1) 574.1606 17416.730 1.508E+01 R-----[ 0]
( 0 1) (15 0) 574.1647 17416.600 1.507E+01 -----P[ 1]

( 0 0) (16 1) 570.9158 17515.720 2.033E+01 R-----[ 0]
( 0 1) (16 0) 570.9200 17515.590 2.032E+01 -----P[ 1]

( 0 0) (17 1) 567.7672 17612.850 2.645E+01 R-----[ 0]
( 0 1) (17 0) 567.7713 17612.720 2.644E+01 -----P[ 1]

( 0 0) (18 1) 564.7129 17708.110 3.334E+01 R-----[ 0]
( 0 1) (18 0) 564.7169 17707.990 3.333E+01 -----P[ 1]

( 0 0) (19 1) 561.7511 17801.480 4.078E+01 R-----[ 0]
( 0 1) (19 0) 561.7551 17801.350 4.077E+01 -----P[ 1]

( 0 0) (20 1) 558.8800 17892.930 4.859E+01 R-----[ 0]
( 0 1) (20 0) 558.8839 17892.800 4.857E+01 -----P[ 1]

( 0 0) (21 1) 556.0981 17982.440 5.647E+01 R-----[ 0]
( 0 1) (21 0) 556.1019 17982.310 5.645E+01 -----P[ 1]

( 0 0) (22 1) 553.4037 18069.990 6.421E+01 R-----[ 0]
( 0 1) (22 0) 553.4075 18069.870 6.419E+01 -----P[ 1]

( 0 0) (23 1) 550.7953 18155.570 7.152E+01 R-----[ 0]
( 0 1) (23 0) 550.7990 18155.440 7.149E+01 -----P[ 1]

```



```

( 0 0) ( 24 1) 548.2713 18239.140 7.820E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 24 0) 548.2750 18239.020 7.817E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 25 1) 545.8304 18320.710 8.401E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 25 0) 545.8341 18320.580 8.397E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 26 1) 543.4713 18400.240 8.886E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 26 0) 543.4749 18400.120 8.883E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 27 1) 541.1923 18477.720 9.266E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 27 0) 541.1959 18477.600 9.263E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 28 1) 538.9923 18553.140 9.534E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 28 0) 538.9958 18553.020 9.530E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 29 1) 536.8699 18626.490 9.692E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 29 0) 536.8734 18626.370 9.689E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 30 1) 534.8239 18697.740 9.748E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 30 0) 534.8273 18697.630 9.744E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 31 1) 532.8527 18766.910 9.704E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 31 0) 532.8561 18766.790 9.701E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 32 1) 530.9553 18833.980 9.577E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 32 0) 530.9587 18833.860 9.573E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 33 1) 529.1303 18898.940 9.370E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 33 0) 529.1337 18898.820 9.366E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 34 1) 527.3765 18961.790 9.105E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 34 0) 527.3798 18961.670 9.102E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 35 1) 525.6924 19022.530 8.784E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 35 0) 525.6956 19022.410 8.781E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 36 1) 524.0768 19081.170 8.426E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 36 0) 524.0800 19081.060 8.423E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 37 1) 522.5283 19137.720 8.040E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 37 0) 522.5315 19137.600 8.037E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 38 1) 521.0455 19192.180 7.635E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 38 0) 521.0487 19192.060 7.633E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 39 1) 519.6272 19244.570 7.218E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 39 0) 519.6303 19244.450 7.215E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 40 1) 518.2719 19294.890 6.797E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 40 0) 518.2750 19294.780 6.795E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 41 1) 516.9781 19343.180 6.377E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 41 0) 516.9811 19343.070 6.374E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 42 1) 515.7444 19389.450 5.966E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 42 0) 515.7474 19389.340 5.964E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 43 1) 514.5695 19433.720 5.569E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 43 0) 514.5724 19433.610 5.566E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 44 1) 513.4517 19476.030 5.181E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 44 0) 513.4547 19475.920 5.179E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 45 1) 512.3896 19516.400 4.811E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 45 0) 512.3925 19516.290 4.809E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 46 1) 511.3818 19554.860 4.461E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 46 0) 511.3846 19554.750 4.459E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 47 1) 510.4266 19591.460 4.128E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 47 0) 510.4295 19591.350 4.127E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 48 1) 509.5226 19626.210 3.813E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 48 0) 509.5255 19626.110 3.812E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 49 1) 508.6683 19659.180 3.516E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 49 0) 508.6711 19659.070 3.514E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 50 1) 507.8620 19690.390 3.239E+01 R-----[ 0]

```

```

( 0 1) ( 50 0) 507.8648 19690.280 3.238E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 51 1) 507.1024 19719.880 2.981E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 51 0) 507.1051 19719.780 2.979E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 52 1) 506.3879 19747.710 2.738E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 52 0) 506.3906 19747.600 2.737E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 53 1) 505.7171 19773.900 2.513E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 53 0) 505.7198 19773.800 2.512E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 54 1) 505.0885 19798.510 2.303E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 54 0) 505.0911 19798.410 2.302E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 55 1) 504.5006 19821.580 2.108E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 55 0) 504.5032 19821.480 2.107E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 56 1) 503.9520 19843.160 1.926E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 56 0) 503.9546 19843.060 1.925E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 57 1) 503.4414 19863.290 1.757E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 57 0) 503.4440 19863.180 1.757E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 58 1) 502.9673 19882.010 1.601E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 58 0) 502.9698 19881.910 1.600E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 59 1) 502.5283 19899.380 1.455E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 59 0) 502.5308 19899.280 1.455E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 60 1) 502.1231 19915.440 1.320E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 60 0) 502.1255 19915.340 1.320E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 61 1) 501.7502 19930.240 1.195E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 61 0) 501.7526 19930.140 1.194E+01 -----P[ 1]

( 0 0) ( 62 1) 501.4082 19943.830 1.078E+01 R-----[ 0]
( 0 1) ( 62 0) 501.4106 19943.730 1.078E+01 -----P[ 1]

( 1 0) ( 0 1) 644.6893 15511.350 3.275E-05 R-----[ 0]
( 1 1) ( 0 0) 644.6948 15511.210 3.274E-05 -----P[ 1]

( 1 0) ( 1 1) 639.5700 15635.500 4.572E-04 R-----[ 0]
( 1 1) ( 1 0) 639.5754 15635.370 4.571E-04 -----P[ 1]

( 1 0) ( 2 1) 634.5933 15758.120 3.231E-03 R-----[ 0]
( 1 1) ( 2 0) 634.5986 15757.990 3.230E-03 -----P[ 1]

( 1 0) ( 3 1) 629.7549 15879.190 1.544E-02 R-----[ 0]
( 1 1) ( 3 0) 629.7601 15879.060 1.543E-02 -----P[ 1]

( 1 0) ( 4 1) 625.0512 15998.690 5.623E-02 R-----[ 0]
( 1 1) ( 4 0) 625.0563 15998.560 5.621E-02 -----P[ 1]

( 1 0) ( 5 1) 620.4785 16116.590 1.668E-01 R-----[ 0]
( 1 1) ( 5 0) 620.4836 16116.460 1.667E-01 -----P[ 1]

( 1 0) ( 6 1) 616.0335 16232.880 4.205E-01 R-----[ 0]
( 1 1) ( 6 0) 616.0385 16232.750 4.203E-01 -----P[ 1]

( 1 0) ( 7 1) 611.7129 16347.540 9.275E-01 R-----[ 0]
( 1 1) ( 7 0) 611.7177 16347.410 9.272E-01 -----P[ 1]

( 1 0) ( 8 1) 607.5134 16460.540 1.830E+00 R-----[ 0]
( 1 1) ( 8 0) 607.5182 16460.410 1.829E+00 -----P[ 1]

( 1 0) ( 9 1) 603.4323 16571.870 3.278E+00 R-----[ 0]
( 1 1) ( 9 0) 603.4370 16571.740 3.277E+00 -----P[ 1]

( 1 0) ( 10 1) 599.4666 16681.500 5.406E+00 R-----[ 0]
( 1 1) ( 10 0) 599.4712 16681.370 5.404E+00 -----P[ 1]

( 1 0) ( 11 1) 595.6135 16789.410 8.289E+00 R-----[ 0]
( 1 1) ( 11 0) 595.6181 16789.280 8.286E+00 -----P[ 1]

( 1 0) ( 12 1) 591.8707 16895.580 1.191E+01 R-----[ 0]
( 1 1) ( 12 0) 591.8752 16895.450 1.191E+01 -----P[ 1]

( 1 0) ( 13 1) 588.2357 16999.990 1.616E+01 R-----[ 0]
( 1 1) ( 13 0) 588.2401 16999.860 1.615E+01 -----P[ 1]

```



```

( 1 0) ( 14 1) 584.7061 17102.610 2.079E+01 R-----[ 0]
( 1 1) ( 14 0) 584.7104 17102.480 2.078E+01 -----P[ 1]

( 1 0) ( 15 1) 581.2794 17203.430 2.551E+01 R-----[ 0]
( 1 1) ( 15 0) 581.2838 17203.300 2.550E+01 -----P[ 1]

( 1 0) ( 16 1) 577.9540 17302.420 2.996E+01 R-----[ 0]
( 1 1) ( 16 0) 577.9582 17302.290 2.995E+01 -----P[ 1]

( 1 0) ( 17 1) 574.7275 17399.550 3.377E+01 R-----[ 0]
( 1 1) ( 17 0) 574.7317 17399.420 3.376E+01 -----P[ 1]

( 1 0) ( 18 1) 571.5980 17494.810 3.666E+01 R-----[ 0]
( 1 1) ( 18 0) 571.6021 17494.690 3.665E+01 -----P[ 1]

( 1 0) ( 19 1) 568.5637 17588.180 3.838E+01 R-----[ 0]
( 1 1) ( 19 0) 568.5677 17588.050 3.836E+01 -----P[ 1]

( 1 0) ( 20 1) 565.6228 17679.630 3.883E+01 R-----[ 0]
( 1 1) ( 20 0) 565.6268 17679.500 3.881E+01 -----P[ 1]

( 1 0) ( 21 1) 562.7735 17769.140 3.800E+01 R-----[ 0]
( 1 1) ( 21 0) 562.7775 17769.010 3.799E+01 -----P[ 1]

( 1 0) ( 22 1) 560.0142 17856.690 3.603E+01 R-----[ 0]
( 1 1) ( 22 0) 560.0181 17856.570 3.602E+01 -----P[ 1]

( 1 0) ( 23 1) 557.3432 17942.270 3.309E+01 R-----[ 0]
( 1 1) ( 23 0) 557.3470 17942.140 3.308E+01 -----P[ 1]

( 1 0) ( 24 1) 554.7590 18025.840 2.945E+01 R-----[ 0]
( 1 1) ( 24 0) 554.7628 18025.720 2.944E+01 -----P[ 1]

( 1 0) ( 25 1) 552.2602 18107.410 2.536E+01 R-----[ 0]
( 1 1) ( 25 0) 552.2640 18107.280 2.535E+01 -----P[ 1]

( 1 0) ( 26 1) 549.8452 18186.940 2.111E+01 R-----[ 0]
( 1 1) ( 26 0) 549.8489 18186.810 2.110E+01 -----P[ 1]

( 1 0) ( 27 1) 547.5126 18264.420 1.695E+01 R-----[ 0]
( 1 1) ( 27 0) 547.5163 18264.300 1.694E+01 -----P[ 1]

( 1 0) ( 28 1) 545.2610 18339.840 1.305E+01 R-----[ 0]
( 1 1) ( 28 0) 545.2646 18339.720 1.304E+01 -----P[ 1]

( 1 0) ( 29 1) 543.0891 18413.190 9.579E+00 R-----[ 0]
( 1 1) ( 29 0) 543.0927 18413.060 9.576E+00 -----P[ 1]

( 1 0) ( 30 1) 540.9955 18484.440 6.633E+00 R-----[ 0]
( 1 1) ( 30 0) 540.9990 18484.320 6.631E+00 -----P[ 1]

( 1 0) ( 31 1) 538.9786 18553.610 4.256E+00 R-----[ 0]
( 1 1) ( 31 0) 538.9821 18553.490 4.254E+00 -----P[ 1]

( 1 0) ( 32 1) 537.0374 18620.680 2.448E+00 R-----[ 0]
( 1 1) ( 32 0) 537.0409 18620.560 2.447E+00 -----P[ 1]

( 1 0) ( 33 1) 535.1705 18685.630 1.183E+00 R-----[ 0]
( 1 1) ( 33 0) 535.1739 18685.520 1.182E+00 -----P[ 1]

( 1 0) ( 34 1) 533.3765 18748.480 4.057E-01 R-----[ 0]
( 1 1) ( 34 0) 533.3798 18748.370 4.056E-01 -----P[ 1]

( 1 0) ( 35 1) 531.6539 18809.230 4.651E-02 R-----[ 0]
( 1 1) ( 35 0) 531.6572 18809.110 4.649E-02 -----P[ 1]

( 1 0) ( 36 1) 530.0015 18867.870 3.011E-02 R-----[ 0]
( 1 1) ( 36 0) 530.0048 18867.760 3.010E-02 -----P[ 1]

( 1 0) ( 37 1) 528.4178 18924.420 2.801E-01 R-----[ 0]
( 1 1) ( 37 0) 528.4211 18924.300 2.800E-01 -----P[ 1]

( 1 0) ( 38 1) 526.9015 18978.880 7.241E-01 R-----[ 0]
( 1 1) ( 38 0) 526.9047 18978.760 7.239E-01 -----P[ 1]

( 1 0) ( 39 1) 525.4511 19031.270 1.297E+00 R-----[ 0]
( 1 1) ( 39 0) 525.4543 19031.150 1.297E+00 -----P[ 1]

( 1 0) ( 40 1) 524.0654 19081.590 1.942E+00 R-----[ 0]
( 1 1) ( 40 0) 524.0685 19081.480 1.942E+00 -----P[ 1]

```

```

( 1 0) ( 41 1) 522.7424 19129.880 2.613E+00 R-----[ 0]
( 1 1) ( 41 0) 522.7455 19129.770 2.612E+00 -----P[ 1]

( 1 0) ( 42 1) 521.4811 19176.150 3.273E+00 R-----[ 0]
( 1 1) ( 42 0) 521.4843 19176.040 3.272E+00 -----P[ 1]

( 1 0) ( 43 1) 520.2800 19220.420 3.893E+00 R-----[ 0]
( 1 1) ( 43 0) 520.2830 19220.310 3.891E+00 -----P[ 1]

( 1 0) ( 44 1) 519.1373 19262.730 4.455E+00 R-----[ 0]
( 1 1) ( 44 0) 519.1403 19262.620 4.453E+00 -----P[ 1]

( 1 0) ( 45 1) 518.0516 19303.100 4.943E+00 R-----[ 0]
( 1 1) ( 45 0) 518.0546 19302.990 4.941E+00 -----P[ 1]

( 1 0) ( 46 1) 517.0214 19341.560 5.351E+00 R-----[ 0]
( 1 1) ( 46 0) 517.0243 19341.450 5.349E+00 -----P[ 1]

( 1 0) ( 47 1) 516.0450 19378.150 5.676E+00 R-----[ 0]
( 1 1) ( 47 0) 516.0479 19378.040 5.674E+00 -----P[ 1]

( 1 0) ( 48 1) 515.1211 19412.910 5.918E+00 R-----[ 0]
( 1 1) ( 48 0) 515.1239 19412.800 5.916E+00 -----P[ 1]

( 1 0) ( 49 1) 514.2478 19445.880 6.083E+00 R-----[ 0]
( 1 1) ( 49 0) 514.2507 19445.770 6.080E+00 -----P[ 1]

( 1 0) ( 50 1) 513.4238 19477.090 6.172E+00 R-----[ 0]
( 1 1) ( 50 0) 513.4266 19476.980 6.170E+00 -----P[ 1]

( 1 0) ( 51 1) 512.6475 19506.580 6.195E+00 R-----[ 0]
( 1 1) ( 51 0) 512.6503 19506.480 6.193E+00 -----P[ 1]

( 1 0) ( 52 1) 511.9173 19534.410 6.157E+00 R-----[ 0]
( 1 1) ( 52 0) 511.9200 19534.300 6.155E+00 -----P[ 1]

( 1 0) ( 53 1) 511.2318 19560.600 6.065E+00 R-----[ 0]
( 1 1) ( 53 0) 511.2345 19560.500 6.063E+00 -----P[ 1]

( 1 0) ( 54 1) 510.5894 19585.210 5.927E+00 R-----[ 0]
( 1 1) ( 54 0) 510.5920 19585.110 5.925E+00 -----P[ 1]

( 1 0) ( 55 1) 509.9886 19608.280 5.750E+00 R-----[ 0]
( 1 1) ( 55 0) 509.9912 19608.180 5.748E+00 -----P[ 1]

( 1 0) ( 56 1) 509.4280 19629.860 5.540E+00 R-----[ 0]
( 1 1) ( 56 0) 509.4307 19629.760 5.538E+00 -----P[ 1]

( 1 0) ( 57 1) 508.9063 19649.980 5.303E+00 R-----[ 0]
( 1 1) ( 57 0) 508.9089 19649.880 5.301E+00 -----P[ 1]

( 1 0) ( 58 1) 508.4218 19668.710 5.045E+00 R-----[ 0]
( 1 1) ( 58 0) 508.4243 19668.610 5.044E+00 -----P[ 1]

( 1 0) ( 59 1) 507.9732 19686.080 4.771E+00 R-----[ 0]
( 1 1) ( 59 0) 507.9758 19685.980 4.769E+00 -----P[ 1]

( 1 0) ( 60 1) 507.5592 19702.130 4.486E+00 R-----[ 0]
( 1 1) ( 60 0) 507.5617 19702.040 4.484E+00 -----P[ 1]

( 1 0) ( 61 1) 507.1782 19716.940 4.193E+00 R-----[ 0]
( 1 1) ( 61 0) 507.1807 19716.840 4.191E+00 -----P[ 1]

( 1 0) ( 62 1) 506.8288 19730.530 3.897E+00 R-----[ 0]
( 1 1) ( 62 0) 506.8312 19730.430 3.895E+00 -----P[ 1]

( 2 0) ( 1 1) 648.3641 15423.430 1.818E-03 R-----[ 0]
( 2 1) ( 1 0) 648.3696 15423.300 1.817E-03 -----P[ 1]

( 2 0) ( 2 1) 643.2501 15546.050 1.155E-02 R-----[ 0]
( 2 1) ( 2 0) 643.2556 15545.920 1.155E-02 -----P[ 1]

( 2 0) ( 3 1) 638.2794 15667.120 4.952E-02 R-----[ 0]
( 2 1) ( 3 0) 638.2847 15666.990 4.950E-02 -----P[ 1]

( 2 0) ( 4 1) 633.4479 15786.620 1.613E-01 R-----[ 0]
( 2 1) ( 4 0) 633.4532 15786.490 1.613E-01 -----P[ 1]

```



```

( 2 0) ( 5 1) 628.7521 15904.520 4.267E-01 R-----[ 0]
( 2 1) ( 5 0) 628.7572 15904.390 4.265E-01 -----P[ 1]

( 2 0) ( 6 1) 624.1882 16020.810 9.551E-01 R-----[ 0]
( 2 1) ( 6 0) 624.1932 16020.680 9.548E-01 -----P[ 1]

( 2 0) ( 7 1) 619.7527 16135.470 1.863E+00 R-----[ 0]
( 2 1) ( 7 0) 619.7577 16135.340 1.862E+00 -----P[ 1]

( 2 0) ( 8 1) 615.4426 16248.470 3.232E+00 R-----[ 0]
( 2 1) ( 8 0) 615.4475 16248.340 3.231E+00 -----P[ 1]

( 2 0) ( 9 1) 611.2546 16359.790 5.067E+00 R-----[ 0]
( 2 1) ( 9 0) 611.2594 16359.670 5.065E+00 -----P[ 1]

( 2 0) (10 1) 607.1857 16469.430 7.268E+00 R-----[ 0]
( 2 1) (10 0) 607.1905 16469.300 7.266E+00 -----P[ 1]

( 2 0) (11 1) 603.2332 16577.340 9.620E+00 R-----[ 0]
( 2 1) (11 0) 603.2379 16577.210 9.617E+00 -----P[ 1]

( 2 0) (12 1) 599.3943 16683.510 1.183E+01 R-----[ 0]
( 2 1) (12 0) 599.3989 16683.380 1.182E+01 -----P[ 1]

( 2 0) (13 1) 595.6666 16787.920 1.359E+01 R-----[ 0]
( 2 1) (13 0) 595.6711 16787.790 1.358E+01 -----P[ 1]

( 2 0) (14 1) 592.0474 16890.540 1.463E+01 R-----[ 0]
( 2 1) (14 0) 592.0519 16890.410 1.462E+01 -----P[ 1]

( 2 0) (15 1) 588.5345 16991.360 1.479E+01 R-----[ 0]
( 2 1) (15 0) 588.5389 16991.230 1.478E+01 -----P[ 1]

( 2 0) (16 1) 585.1257 17090.340 1.404E+01 R-----[ 0]
( 2 1) (16 0) 585.1301 17090.220 1.404E+01 -----P[ 1]

( 2 0) (17 1) 581.8189 17187.480 1.250E+01 R-----[ 0]
( 2 1) (17 0) 581.8232 17187.350 1.249E+01 -----P[ 1]

( 2 0) (18 1) 578.6119 17282.740 1.038E+01 R-----[ 0]
( 2 1) (18 0) 578.6161 17282.620 1.037E+01 -----P[ 1]

( 2 0) (19 1) 575.5029 17376.110 7.959E+00 R-----[ 0]
( 2 1) (19 0) 575.5071 17375.980 7.956E+00 -----P[ 1]

( 2 0) (20 1) 572.4900 17467.550 5.547E+00 R-----[ 0]
( 2 1) (20 0) 572.4941 17467.430 5.545E+00 -----P[ 1]

( 2 0) (21 1) 569.5712 17557.070 3.400E+00 R-----[ 0]
( 2 1) (21 0) 569.5753 17556.940 3.399E+00 -----P[ 1]

( 2 0) (22 1) 566.7451 17644.620 1.712E+00 R-----[ 0]
( 2 1) (22 0) 566.7490 17644.490 1.712E+00 -----P[ 1]

( 2 0) (23 1) 564.0096 17730.190 5.915E-01 R-----[ 0]
( 2 1) (23 0) 564.0135 17730.070 5.913E-01 -----P[ 1]

( 2 0) (24 1) 561.3635 17813.770 5.928E-02 R-----[ 0]
( 2 1) (24 0) 561.3673 17813.650 5.926E-02 -----P[ 1]

( 2 0) (25 1) 558.8049 17895.330 6.421E-02 R-----[ 0]
( 2 1) (25 0) 558.8087 17895.210 6.419E-02 -----P[ 1]

( 2 0) (26 1) 556.3325 17974.860 5.035E-01 R-----[ 0]
( 2 1) (26 0) 556.3362 17974.740 5.033E-01 -----P[ 1]

( 2 0) (27 1) 553.9446 18052.350 1.245E+00 R-----[ 0]
( 2 1) (27 0) 553.9484 18052.220 1.245E+00 -----P[ 1]

( 2 0) (28 1) 551.6399 18127.770 2.153E+00 R-----[ 0]
( 2 1) (28 0) 551.6436 18127.650 2.152E+00 -----P[ 1]

( 2 0) (29 1) 549.4169 18201.110 3.099E+00 R-----[ 0]
( 2 1) (29 0) 549.4206 18200.990 3.098E+00 -----P[ 1]

( 2 0) (30 1) 547.2744 18272.370 3.982E+00 R-----[ 0]
( 2 1) (30 0) 547.2779 18272.250 3.980E+00 -----P[ 1]

( 2 0) (31 1) 545.2105 18341.540 4.722E+00 R-----[ 0]
( 2 1) (31 0) 545.2141 18341.420 4.721E+00 -----P[ 1]

```

```

( 2 0) (32 1) 543.2242 18408.600 5.277E+00 R-----[ 0]
( 2 1) (32 0) 543.2278 18408.480 5.275E+00 -----P[ 1]

( 2 0) (33 1) 541.3141 18473.560 5.628E+00 R-----[ 0]
( 2 1) (33 0) 541.3176 18473.440 5.626E+00 -----P[ 1]

( 2 0) (34 1) 539.4787 18536.410 5.777E+00 R-----[ 0]
( 2 1) (34 0) 539.4821 18536.290 5.775E+00 -----P[ 1]

( 2 0) (35 1) 537.7166 18597.160 5.740E+00 R-----[ 0]
( 2 1) (35 0) 537.7200 18597.040 5.738E+00 -----P[ 1]

( 2 0) (36 1) 536.0263 18655.800 5.549E+00 R-----[ 0]
( 2 1) (36 0) 536.0297 18655.680 5.547E+00 -----P[ 1]

( 2 0) (37 1) 534.4066 18712.350 5.234E+00 R-----[ 0]
( 2 1) (37 0) 534.4099 18712.230 5.232E+00 -----P[ 1]

( 2 0) (38 1) 532.8557 18766.810 4.832E+00 R-----[ 0]
( 2 1) (38 0) 532.8589 18766.690 4.830E+00 -----P[ 1]

( 2 0) (39 1) 531.3724 18819.190 4.376E+00 R-----[ 0]
( 2 1) (39 0) 531.3757 18819.080 4.374E+00 -----P[ 1]

( 2 0) (40 1) 529.9553 18869.520 3.898E+00 R-----[ 0]
( 2 1) (40 0) 529.9584 18869.400 3.897E+00 -----P[ 1]

( 2 0) (41 1) 528.6025 18917.810 3.403E+00 R-----[ 0]
( 2 1) (41 0) 528.6057 18917.690 3.402E+00 -----P[ 1]

( 2 0) (42 1) 527.3128 18964.080 2.930E+00 R-----[ 0]
( 2 1) (42 0) 527.3159 18963.960 2.929E+00 -----P[ 1]

( 2 0) (43 1) 526.0846 19008.350 2.486E+00 R-----[ 0]
( 2 1) (43 0) 526.0877 19008.240 2.486E+00 -----P[ 1]

( 2 0) (44 1) 524.9164 19050.650 2.080E+00 R-----[ 0]
( 2 1) (44 0) 524.9194 19050.540 2.079E+00 -----P[ 1]

( 2 0) (45 1) 523.8064 19091.020 1.715E+00 R-----[ 0]
( 2 1) (45 0) 523.8094 19090.910 1.715E+00 -----P[ 1]

( 2 0) (46 1) 522.7531 19129.490 1.395E+00 R-----[ 0]
( 2 1) (46 0) 522.7561 19129.380 1.395E+00 -----P[ 1]

( 2 0) (47 1) 521.7551 19166.080 1.119E+00 R-----[ 0]
( 2 1) (47 0) 521.7580 19165.970 1.119E+00 -----P[ 1]

( 2 0) (48 1) 520.8105 19200.840 8.848E-01 R-----[ 0]
( 2 1) (48 0) 520.8135 19200.730 8.844E-01 -----P[ 1]

( 2 0) (49 1) 519.9179 19233.800 6.889E-01 R-----[ 0]
( 2 1) (49 0) 519.9208 19233.700 6.887E-01 -----P[ 1]

( 2 0) (50 1) 519.0756 19265.020 5.282E-01 R-----[ 0]
( 2 1) (50 0) 519.0785 19264.910 5.280E-01 -----P[ 1]

( 2 0) (51 1) 518.2822 19294.510 3.979E-01 R-----[ 0]
( 2 1) (51 0) 518.2850 19294.400 3.978E-01 -----P[ 1]

( 2 0) (52 1) 517.5358 19322.330 2.942E-01 R-----[ 0]
( 2 1) (52 0) 517.5386 19322.230 2.941E-01 -----P[ 1]

( 2 0) (53 1) 516.8352 19348.530 2.129E-01 R-----[ 0]
( 2 1) (53 0) 516.8380 19348.420 2.128E-01 -----P[ 1]

( 2 0) (54 1) 516.1786 19373.140 1.503E-01 R-----[ 0]
( 2 1) (54 0) 516.1814 19373.040 1.503E-01 -----P[ 1]

( 2 0) (55 1) 515.5646 19396.210 1.031E-01 R-----[ 0]
( 2 1) (55 0) 515.5674 19396.110 1.030E-01 -----P[ 1]

( 2 0) (56 1) 514.9918 19417.790 6.824E-02 R-----[ 0]
( 2 1) (56 0) 514.9945 19417.680 6.821E-02 -----P[ 1]

( 2 0) (57 1) 514.4586 19437.910 4.318E-02 R-----[ 0]
( 2 1) (57 0) 514.4612 19437.810 4.316E-02 -----P[ 1]

( 2 0) (58 1) 513.9634 19456.640 2.578E-02 R-----[ 0]

```



```

( 2 1) ( 58 0) 513.9661 19456.540 2.577E-02 -----P[ 1]
( 2 0) ( 59 1) 513.5051 19474.000 1.416E-02 R-----[ 0]
( 2 1) ( 59 0) 513.5077 19473.900 1.416E-02 -----P[ 1]
( 2 0) ( 60 1) 513.0820 19490.060 6.857E-03 R-----[ 0]
( 2 1) ( 60 0) 513.0845 19489.960 6.855E-03 -----P[ 1]
( 2 0) ( 61 1) 512.6926 19504.870 2.660E-03 R-----[ 0]
( 2 1) ( 61 0) 512.6952 19504.770 2.659E-03 -----P[ 1]
( 2 0) ( 62 1) 512.3356 19518.460 6.219E-04 R-----[ 0]
( 2 1) ( 62 0) 512.3381 19518.360 6.217E-04 -----P[ 1]

( 3 0) ( 3 1) 646.9861 15456.280 1.011E-01 R-----[ 0]
( 3 1) ( 3 0) 646.9916 15456.150 1.010E-01 -----P[ 1]
( 3 0) ( 4 1) 642.0224 15575.780 2.905E-01 R-----[ 0]
( 3 1) ( 4 0) 642.0278 15575.650 2.904E-01 -----P[ 1]
( 3 0) ( 5 1) 637.1990 15693.680 6.736E-01 R-----[ 0]
( 3 1) ( 5 0) 637.2043 15693.550 6.734E-01 -----P[ 1]
( 3 0) ( 6 1) 632.5121 15809.970 1.314E+00 R-----[ 0]
( 3 1) ( 6 0) 632.5173 15809.840 1.314E+00 -----P[ 1]
( 3 0) ( 7 1) 627.9581 15924.630 2.215E+00 R-----[ 0]
( 3 1) ( 7 0) 627.9631 15924.500 2.214E+00 -----P[ 1]
( 3 0) ( 8 1) 623.5334 16037.630 3.288E+00 R-----[ 0]
( 3 1) ( 8 0) 623.5385 16037.500 3.287E+00 -----P[ 1]
( 3 0) ( 9 1) 619.2350 16148.960 4.361E+00 R-----[ 0]
( 3 1) ( 9 0) 619.2399 16148.830 4.360E+00 -----P[ 1]
( 3 0) ( 10 1) 615.0595 16258.590 5.211E+00 R-----[ 0]
( 3 1) ( 10 0) 615.0644 16258.460 5.209E+00 -----P[ 1]
( 3 0) ( 11 1) 611.0042 16366.500 5.638E+00 R-----[ 0]
( 3 1) ( 11 0) 611.0090 16366.370 5.636E+00 -----P[ 1]
( 3 0) ( 12 1) 607.0660 16472.670 5.528E+00 R-----[ 0]
( 3 1) ( 12 0) 607.0707 16472.540 5.526E+00 -----P[ 1]
( 3 0) ( 13 1) 603.2426 16577.080 4.892E+00 R-----[ 0]
( 3 1) ( 13 0) 603.2472 16576.950 4.890E+00 -----P[ 1]
( 3 0) ( 14 1) 599.5311 16679.700 3.863E+00 R-----[ 0]
( 3 1) ( 14 0) 599.5356 16679.580 3.862E+00 -----P[ 1]
( 3 0) ( 15 1) 595.9291 16780.520 2.657E+00 R-----[ 0]
( 3 1) ( 15 0) 595.9335 16780.390 2.656E+00 -----P[ 1]
( 3 0) ( 16 1) 592.4344 16879.510 1.507E+00 R-----[ 0]
( 3 1) ( 16 0) 592.4388 16879.380 1.506E+00 -----P[ 1]
( 3 0) ( 17 1) 589.0447 16976.640 6.187E-01 R-----[ 0]
( 3 1) ( 17 0) 589.0490 16976.520 6.185E-01 -----P[ 1]
( 3 0) ( 18 1) 585.7578 17071.900 1.109E-01 R-----[ 0]
( 3 1) ( 18 0) 585.7620 17071.780 1.109E-01 -----P[ 1]
( 3 0) ( 19 1) 582.5718 17165.270 1.155E-02 R-----[ 0]
( 3 1) ( 19 0) 582.5759 17165.140 1.155E-02 -----P[ 1]
( 3 0) ( 20 1) 579.4845 17256.720 2.631E-01 R-----[ 0]
( 3 1) ( 20 0) 579.4886 17256.590 2.630E-01 -----P[ 1]
( 3 0) ( 21 1) 576.4942 17346.230 7.505E-01 R-----[ 0]
( 3 1) ( 21 0) 576.4983 17346.110 7.502E-01 -----P[ 1]
( 3 0) ( 22 1) 573.5991 17433.780 1.335E+00 R-----[ 0]
( 3 1) ( 22 0) 573.6031 17433.660 1.334E+00 -----P[ 1]
( 3 0) ( 23 1) 570.7972 17519.360 1.885E+00 R-----[ 0]
( 3 1) ( 23 0) 570.8012 17519.230 1.884E+00 -----P[ 1]

```

```

( 3 0) ( 24 1) 568.0872 17602.930 2.303E+00 R-----[ 0]
( 3 1) ( 24 0) 568.0911 17602.810 2.302E+00 -----P[ 1]
( 3 0) ( 25 1) 565.4670 17684.500 2.532E+00 R-----[ 0]
( 3 1) ( 25 0) 565.4709 17684.380 2.531E+00 -----P[ 1]
( 3 0) ( 26 1) 562.9355 17764.030 2.555E+00 R-----[ 0]
( 3 1) ( 26 0) 562.9393 17763.910 2.554E+00 -----P[ 1]
( 3 0) ( 27 1) 560.4907 17841.510 2.398E+00 R-----[ 0]
( 3 1) ( 27 0) 560.4945 17841.390 2.397E+00 -----P[ 1]
( 3 0) ( 28 1) 558.1313 17916.930 2.100E+00 R-----[ 0]
( 3 1) ( 28 0) 558.1351 17916.810 2.099E+00 -----P[ 1]
( 3 0) ( 29 1) 555.8558 17990.280 1.720E+00 R-----[ 0]
( 3 1) ( 29 0) 555.8596 17990.160 1.719E+00 -----P[ 1]
( 3 0) ( 30 1) 553.6628 18061.530 1.311E+00 R-----[ 0]
( 3 1) ( 30 0) 553.6664 18061.420 1.311E+00 -----P[ 1]
( 3 0) ( 31 1) 551.5507 18130.700 9.199E-01 R-----[ 0]
( 3 1) ( 31 0) 551.5542 18130.580 9.196E-01 -----P[ 1]
( 3 0) ( 32 1) 549.5180 18197.770 5.811E-01 R-----[ 0]
( 3 1) ( 32 0) 549.5215 18197.650 5.809E-01 -----P[ 1]
( 3 0) ( 33 1) 547.5634 18262.720 3.163E-01 R-----[ 0]
( 3 1) ( 33 0) 547.5670 18262.610 3.162E-01 -----P[ 1]
( 3 0) ( 34 1) 545.6855 18325.570 1.336E-01 R-----[ 0]
( 3 1) ( 34 0) 545.6889 18325.460 1.336E-01 -----P[ 1]
( 3 0) ( 35 1) 543.8826 18386.320 3.123E-02 R-----[ 0]
( 3 1) ( 35 0) 543.8860 18386.210 3.122E-02 -----P[ 1]
( 3 0) ( 36 1) 542.1534 18444.960 8.305E-08 R-----[ 0]
( 3 1) ( 36 0) 542.1568 18444.850 8.302E-08 -----P[ 1]
( 3 0) ( 37 1) 540.4965 18501.510 2.649E-02 R-----[ 0]
( 3 1) ( 37 0) 540.4998 18501.390 2.648E-02 -----P[ 1]
( 3 0) ( 38 1) 538.9102 18555.970 9.546E-02 R-----[ 0]
( 3 1) ( 38 0) 538.9135 18555.860 9.543E-02 -----P[ 1]
( 3 0) ( 39 1) 537.3930 18608.360 1.919E-01 R-----[ 0]
( 3 1) ( 39 0) 537.3963 18608.240 1.919E-01 -----P[ 1]
( 3 0) ( 40 1) 535.9436 18658.680 3.022E-01 R-----[ 0]
( 3 1) ( 40 0) 535.9468 18658.570 3.020E-01 -----P[ 1]
( 3 0) ( 41 1) 534.5601 18706.970 4.151E-01 R-----[ 0]
( 3 1) ( 41 0) 534.5634 18706.860 4.150E-01 -----P[ 1]
( 3 0) ( 42 1) 533.2412 18753.240 5.221E-01 R-----[ 0]
( 3 1) ( 42 0) 533.2444 18753.130 5.219E-01 -----P[ 1]
( 3 0) ( 43 1) 531.9853 18797.510 6.171E-01 R-----[ 0]
( 3 1) ( 43 0) 531.9884 18797.400 6.168E-01 -----P[ 1]
( 3 0) ( 44 1) 530.7907 18839.820 6.962E-01 R-----[ 0]
( 3 1) ( 44 0) 530.7938 18839.710 6.959E-01 -----P[ 1]
( 3 0) ( 45 1) 529.6558 18880.190 7.577E-01 R-----[ 0]
( 3 1) ( 45 0) 529.6588 18880.080 7.574E-01 -----P[ 1]
( 3 0) ( 46 1) 528.5789 18918.650 8.013E-01 R-----[ 0]
( 3 1) ( 46 0) 528.5819 18918.540 8.010E-01 -----P[ 1]
( 3 0) ( 47 1) 527.5585 18955.240 8.277E-01 R-----[ 0]
( 3 1) ( 47 0) 527.5615 18955.140 8.274E-01 -----P[ 1]
( 3 0) ( 48 1) 526.5929 18990.000 8.384E-01 R-----[ 0]
( 3 1) ( 48 0) 526.5958 18989.900 8.381E-01 -----P[ 1]
( 3 0) ( 49 1) 525.6804 19022.970 8.354E-01 R-----[ 0]
( 3 1) ( 49 0) 525.6833 19022.860 8.351E-01 -----P[ 1]
( 3 0) ( 50 1) 524.8193 19054.180 8.210E-01 R-----[ 0]
( 3 1) ( 50 0) 524.8222 19054.070 8.207E-01 -----P[ 1]

```



```

( 3 0) ( 51 1) 524.0082 19083.670 7.971E-01 R-----[ 0]
( 3 1) ( 51 0) 524.0110 19083.570 7.968E-01 -----P[ 1]

( 3 0) ( 52 1) 523.2453 19111.500 7.659E-01 R-----[ 0]
( 3 1) ( 52 0) 523.2481 19111.390 7.657E-01 -----P[ 1]

( 3 0) ( 53 1) 522.5291 19137.690 7.294E-01 R-----[ 0]
( 3 1) ( 53 0) 522.5319 19137.590 7.292E-01 -----P[ 1]

( 3 0) ( 54 1) 521.8580 19162.300 6.891E-01 R-----[ 0]
( 3 1) ( 54 0) 521.8608 19162.200 6.888E-01 -----P[ 1]

( 3 0) ( 55 1) 521.2305 19185.370 6.463E-01 R-----[ 0]
( 3 1) ( 55 0) 521.2332 19185.270 6.461E-01 -----P[ 1]

( 3 0) ( 56 1) 520.6450 19206.950 6.026E-01 R-----[ 0]
( 3 1) ( 56 0) 520.6476 19206.850 6.023E-01 -----P[ 1]

( 3 0) ( 57 1) 520.0999 19227.070 5.583E-01 R-----[ 0]
( 3 1) ( 57 0) 520.1026 19226.970 5.581E-01 -----P[ 1]

( 3 0) ( 58 1) 519.5939 19245.800 5.148E-01 R-----[ 0]
( 3 1) ( 58 0) 519.5966 19245.700 5.146E-01 -----P[ 1]

( 3 0) ( 59 1) 519.1255 19263.170 4.724E-01 R-----[ 0]
( 3 1) ( 59 0) 519.1281 19263.070 4.722E-01 -----P[ 1]

( 3 0) ( 60 1) 518.6931 19279.220 4.314E-01 R-----[ 0]
( 3 1) ( 60 0) 518.6956 19279.130 4.312E-01 -----P[ 1]

( 3 0) ( 61 1) 518.2951 19294.030 3.922E-01 R-----[ 0]
( 3 1) ( 61 0) 518.2977 19293.930 3.920E-01 -----P[ 1]

( 3 0) ( 62 1) 517.9302 19307.620 3.550E-01 R-----[ 0]
( 3 1) ( 62 0) 517.9327 19307.530 3.549E-01 -----P[ 1]

v SCHWINGUNGSBESETZUNG[%]
0 65.07
1 23.39
2 8.46
3 3.08

PARTITION FUNCTION( Zvib*Zrot ) : 6.1
PARTITION FUNCTION( Zvib ) : 1.5
PARTITION FUNCTION( Zrot ) : 4.0
BESETZUNGSGRENZE NICHT ERREICHT !
MIN. ROTATIONSBESETZUNG: J= 0 .001%
MIN. WELLENLAENGE (NM): 490.00NM
MAX. WELLENLAENGE (NM): 650.00NM
VIBRATIONSTEMPERATUR= 300. K
ROTATIONSTEMPERATUR= 300. K
VXMIN= 0 VXMAX= 3
VAMIN= 0 VAMAX= 62
KMIN= 0 KMAX= 1

IGVEQ =2
IGREQ =2
IAVEQ =2
IAREQ =2

```

I₂のハミルトニアン固有値計算コード

```

PROGRAM EigenValueOfI2Hyperfine;
(* Simulation of I2-Eigen Values including Hyperfine Structure
   written by E.HIRAI 1995.5.6 *)

CONST
  grav=9.806;
  pi=3.1415926;
  planck=6.6260755e-34;
  clight=2.99792458e8;
  boltz=1.380658e-23;
  Jup=12.;
  Jlow=18.;
  OutFile='D:\TP\SOURCE\HFINE\JACOB000.DAT';

TYPE
  glnpnp = ARRAY [1..10,1..10] OF real;
  glnp = ARRAY [1..10] OF real;
  gleig = ARRAY [1..11,0..5] OF real;

VAR
  a,v: glnpnp;
  d: glnp;
  n,nrot: integer;

  eQqup,eQqlow: real;
  i0,j0: integer;
  eup,elow,hflin: gleig;
  OutFileVar: text;

(*-----*)
PROCEDURE jacobi(VAR a: glnpnp; n: integer; VAR d: glnp;
  VAR v: glnpnp; VAR nrot: integer);
(* Programs using routine JACOBI must define the types
  TYPE
    glnpnp = ARRAY [1..np,1..np] OF real;
    glnp = ARRAY [1..np] OF real;
  where 'np by np' is the physical dimension of the array
  a into which all arrays are loaded for analysis. *)
LABEL 99;
CONST
  nmax=100;
VAR
  j,iq,ip,i: integer;
  tresh,theta,tau,t,sm,s,h,g,c: real;
  b,z: ARRAY [1..nmax] OF real;
BEGIN
  FOR ip := 1 to n DO BEGIN
    FOR iq := 1 to n DO BEGIN
      v[ip,iq] := 0.0
    END;
    v[ip,ip] := 1.0
  END;
  FOR ip := 1 to n DO BEGIN
    b[ip] := a[ip,ip];
    d[ip] := b[ip];
    z[ip] := 0.0
  END;
  nrot := 0;
  FOR i := 1 to 50 DO BEGIN
    sm := 0.0;
    FOR ip := 1 to n-1 DO BEGIN
      FOR iq := ip+1 to n DO BEGIN
        sm := sm+abs(a[ip,iq])
      END
    END;
    IF (sm = 0.0) THEN GOTO 99;
    IF (i < 4) THEN tresh := 0.2*sm/sqr(n)
    ELSE tresh := 0.0;
    FOR ip := 1 to n-1 DO BEGIN
      FOR iq := ip+1 to n DO BEGIN
        g := 100.0*abs(a[ip,iq]);
        IF ((i > 4) AND ((abs(d[ip])+g) = abs(d[iq]))
          AND ((abs(d[iq])+g) = abs(d[iq])) THEN
          a[ip,iq] := 0.0
        ELSE IF (abs(a[ip,iq]) > tresh) THEN BEGIN
          h := d[iq]-d[ip];
          IF ((abs(h)+g) = abs(h)) THEN BEGIN
            t := a[ip,iq]/h
          END ELSE BEGIN
            theta := 0.5*h/a[ip,iq];
            t := 1.0/(abs(theta)+sqr(1.0+sqr(theta)));
            IF (theta < 0.0) THEN t := -t
          END;
          c := 1.0/sqr(1+sqr(t));

```



```

      s := t*c;
      tau := s/(1.0+c);
      h := t*a[ip,iq];
      z[ip] := z[ip]-h;
      z[iq] := z[iq]+h;
      d[ip] := d[ip]-h;
      d[iq] := d[iq]+h;
      a[ip,iq] := 0.0;
      FOR j := 1 to ip-1 DO BEGIN
        g := a[j,ip];
        h := a[j,iq];
        a[j,ip] := g-s*(h+g*tau);
        a[j,iq] := h+s*(g-h*tau);
      END;
      FOR j := ip+1 to iq-1 DO BEGIN
        g := a[ip,j];
        h := a[j,iq];
        a[ip,j] := g-s*(h+g*tau);
        a[j,iq] := h+s*(g-h*tau);
      END;
      FOR j := iq+1 to n DO BEGIN
        g := a[ip,j];
        h := a[iq,j];
        a[ip,j] := g-s*(h+g*tau);
        a[iq,j] := h+s*(g-h*tau);
      END;
      FOR j := 1 to n DO BEGIN
        g := v[j,ip];
        h := v[j,iq];
        v[j,ip] := g-s*(h+g*tau);
        v[j,iq] := h+s*(g-h*tau);
      END;
      nrot := nrot+1;
    END;
  END;
END;
FOR ip := 1 to n DO BEGIN
  b[ip] := b[ip]+z[ip];
  d[ip] := b[ip];
  z[ip] := 0.0;
END;
writeln('pause in routine JACOBI');
writeln('50 iterations should not happen'); readln;
99: END;
(*-----*)
FUNCTION H(EQ:integer;j:real):real;
BEGIN
  CASE EQ OF
    1 :
      BEGIN
        H:=0.5*j*(2*j-1) /j/(2*j-1);
      END;
    2 :
      BEGIN
        H:=1/10*(2*j-15)*(2*j-1) /j/(2*j-1);
      END;
    3 :
      BEGIN
        H:=0.2*j*(2*j-1) /j/(2*j-1);
      END;
    4 :
      BEGIN
        H:=-1/30*(2*j*j+125*j-153) /j/(2*j-1);
      END;
    5 :
      BEGIN
        H:=1/20*(j-12)*(2*j-1) /j/(2*j-1);
      END;
    6 :
      BEGIN
        H:=-0.0167*j*(2*j-1) /j/(2*j-1);
      END;
    7 :
      BEGIN
        H:=-1/5*(j-2)*(2*j+23) /j/(2*j-1);
      END;
    8 :
      BEGIN
        H:=-1/140*(16*j*j+202*j-273) /j/(2*j-1);

```

```

      END;
    9 :
      BEGIN
        H:=1/20*(2*j-1) /j/(2*j-1);
      END;
    10 :
      BEGIN
        H:=-0.1428*j*(2*j-1) /j/(2*j-1);
      END;
    11 :
      BEGIN
        H:=-1/10*(6*j*j+25*j-126) /j/(2*j-1);
      END;
    12 :
      BEGIN
        H:=-1/140*(34*j*j+145*j-459) /j/(2*j-1);
      END;
    13 :
      BEGIN
        H:=1/100*(2*j*j+9*j-15) /j/(2*j-1);
      END;
    14 :
      BEGIN
        H:=1/14*(j+6)*(2*j-1) /j/(2*j-1);
      END;
    15 :
      BEGIN
        H:=-0.16*j*(2*j-1) /j/(2*j-1);
      END;
    16 :
      BEGIN
        H:=-1/6*(4*j*j+4*j-87) /j/(2*j-1);
      END;
    17 :
      BEGIN
        H:=-1/14*(4*j*j+4*j-57) /j/(2*j-1);
      END;
    18 :
      BEGIN
        H:=1/150*(4*j*j+4*j-33) /j/(2*j-1);
      END;
    19 :
      BEGIN
        H:=1/14*(2*j-3)*(2*j+5) /j/(2*j-1);
      END;
    20 :
      BEGIN
        H:=4/25*(2*j+3)*(2*j-1) /j/(2*j-1);
      END;
    21 :
      BEGIN
        H:=0. ;
      END;
    22 :
      BEGIN
        H:=-1/10*(6*j*j-13*j-145) /j/(2*j-1);
      END;
    23 :
      BEGIN
        H:=-1/140*(34*j*j-77*j-570) /j/(2*j-1);
      END;
    24 :
      BEGIN
        H:=1/100*(2*j*j-5*j-22) /j/(2*j-1);
      END;
    25 :
      BEGIN
        H:=1/14*(2*j+3)*(j-5) /j/(2*j-1);
      END;
    26 :
      BEGIN
        H:=-4/25*(2*j+3)*(j+1) /j/(2*j-1);
      END;
    27 :
      BEGIN
        H:=-1/5*(j+3)*(2*j-21) /j/(2*j-1);
      END;
    28 :
      BEGIN
        H:=-1/140*(16*j*j-170*j-459) /j/(2*j-1);

```



```

END;
29 :
BEGIN
  H:=-1/20*(2*j+3) /j/(2*j-1);
END;
30 :
BEGIN
  H:=-1/7*(2*j+3)*(j+1) /j/(2*j-1);
END;
31 :
BEGIN
  H:=-1/30*(2*j*j-121*j-276) /j/(2*j-1);
END;
32 :
BEGIN
  H:=1/20*(j+13)*(2*j+3) /j/(2*j-1);
END;
33 :
BEGIN
  H:=-1/60*(2*j+3)*(j+1) /j/(2*j-1);
END;
34 :
BEGIN
  H:=1/10*(2*j+17)*(2*j+3) /j/(2*j-1);
END;
35 :
BEGIN
  H:=1/5*(2*j+3)*(j+1) /j/(2*j-1);
END;
36 :
BEGIN
  H:=1/2*(2*j+3)*(j+1) /j/(2*j-1);
END;
37 :
BEGIN
  H:=1/30*SQRT(5.*(2*j+9)*(j+4)/j/(2*j-1));
END;
38 :
BEGIN
  H:=1/20/j*SQRT(5.*(2*j+7)*(j-1)*(j+4)/(2*j-1));
END;
39 :
BEGIN
  H:=9./140*SQRT(5.*(j+3)*(2*j+7)/j/(2*j-1));
END;
40 :
BEGIN
  H:=SQRT(2./7.*(j+3)*(j-1)*(2*j-3)*(2*j+7))/4/j/(2*j-1);
END;
41 :
BEGIN
  H:=9/28/j*SQRT(2.*(2*j+5)*(j-1)*(j+3)/5/(2*j-1));
END;
42 :
BEGIN
  H:=9/25*SQRT(3.*(j+2)*(2*j+5)/7/j/(2*j-1));
END;
43 :
BEGIN
  H:=SQRT(5./7*(2*j-3)*(2*j+5)*(j-2)*(j+3))/6/j/(2*j-1);
END;
44 :
BEGIN
  H:=9.*SQRT(3.*(j-1)*(j+2)*(2*j-3)*(2*j+5))/70/j/(2*j-1);
END;
45 :
BEGIN
  H:=27/50/j*SQRT(2.*(2*j+3)*(j-1)*(j+2)/7/(2*j-1));
END;
46 :
BEGIN
  H:=1/10.*SQRT(14.*(2*j+3)*(j+1)/j/(2*j-1));
END;
47 :
BEGIN
  H:=SQRT(2./7*(j*j-4))*SQRT((4*j*j-25))/4/j/(2*j-1);
END;
48 :
BEGIN
  H:=9/28/j/(2*j-1)*SQRT(2./5*(4*j*j-9)*(j*j-4));

```

```

END;
49 :
BEGIN
  H:=9/25*SQRT(3./7*(j*j-1)*(4*j*j-9))/j/(2*j-1);
END;
50 :
BEGIN
  H:=SQRT(5.*(2*j-5)*(2*j+3)*(j-3)*(j+2))/20/j/(2*j-1);
END;
51 :
BEGIN
  H:=9*SQRT(5.*(j-2)*(2*j-5)*(j+1)*(2*j+3))/140/j/(2*j-1);
END;
52 :
BEGIN
  H:=SQRT(5.*(j-3)*(j+1)*(2*j-7)*(2*j+3))/30/j/(2*j-1);
END;
END;
END;
(*-----*)
PROCEDURE EigenValue(j:real;VAR eigen:gleig);
VAR
  n0:integer;
BEGIN
  {----- I=odd, F=J+5}
  eigen[11,5]:=H(1,j);
  {----- I=odd, F=J+4}
  eigen[10,5]:=H(2,j);
  {----- I=odd, F=J+3}
  n0:=2;

  a[1,1]:=H(4,j);
  a[1,2]:=H(37,j);
  a[2,1]:=H(37,j);
  a[2,2]:=H(6,j);

  jacobi(a,n0,d,v,nrot);

  eigen[9,5]:=d[1];
  eigen[9,3]:=d[2];
  {----- I=odd, F=J+2}
  n0:=2;

  a[1,1]:=H(7,j);
  a[1,2]:=H(38,j);
  a[2,1]:=H(38,j);
  a[2,2]:=H(9,j);

  jacobi(a,n0,d,v,nrot);

  eigen[8,5]:=d[1];
  eigen[8,3]:=d[2];
  {----- I=odd, F=J+1}
  n0:=3;

  a[1,1]:=H(11,j);
  a[1,2]:=H(40,j);
  a[1,3]:=0;
  a[2,1]:=H(40,j);
  a[2,2]:=H(13,j);
  a[2,3]:=H(42,j);
  a[3,1]:=0;
  a[3,2]:=H(42,j);
  a[3,3]:=H(15,j);

  jacobi(a,n0,d,v,nrot);

  eigen[7,5]:=d[1];
  eigen[7,3]:=d[2];
  eigen[7,1]:=d[3];
  {----- I=odd, F=J}
  n0:=3;

  a[1,1]:=H(16,j);
  a[1,2]:=H(43,j);
  a[1,3]:=0;
  a[2,1]:=H(43,j);
  a[2,2]:=H(18,j);
  a[2,3]:=H(45,j);
  a[3,1]:=0;

```



```

a[3,2]:=H(45,j);
a[3,3]:=H(20,j);

jacobi(a,n0,d,v,nrot);

eigen[6,5]:=d[1];
eigen[6,3]:=d[2];
eigen[6,1]:=d[3];
{----- I=odd, F=J-1}
n0:=3;

a[1,1]:=H(22,j);
a[1,2]:=H(47,j);
a[1,3]:=0;
a[2,1]:=H(47,j);
a[2,2]:=H(24,j);
a[2,3]:=H(49,j);
a[3,1]:=0;
a[3,2]:=H(49,j);
a[3,3]:=H(26,j);

jacobi(a,n0,d,v,nrot);

eigen[5,5]:=d[1];
eigen[5,3]:=d[2];
eigen[5,1]:=d[3];
{----- I=odd, F=J-2}
n0:=2;

a[1,1]:=H(27,j);
a[1,2]:=H(50,j);
a[2,1]:=H(50,j);
a[2,2]:=H(29,j);

jacobi(a,n0,d,v,nrot);

eigen[4,5]:=d[1];
eigen[4,3]:=d[2];
{----- I=odd, F=J-3}
n0:=2;

a[1,1]:=H(31,j);
a[1,2]:=H(52,j);
a[2,1]:=H(52,j);
a[2,2]:=H(33,j);

jacobi(a,n0,d,v,nrot);

eigen[3,5]:=d[1];
eigen[3,3]:=d[2];
{----- I=odd, F=J-4}
eigen[2,5]:=H(34,j);
{----- I=odd, F=J-5}
eigen[1,5]:=H(36,j);
{----- I=even, F=J+4}
eigen[10,4]:=H(3,j);
{----- I=even, F=J+3}
eigen[ 9,4]:=H(5,j);
{----- I=even, F=J+2}
n0:=2;

a[1,1]:=H(8,j);
a[1,2]:=H(39,j);
a[2,1]:=H(39,j);
a[2,2]:=H(10,j);

jacobi(a,n0,d,v,nrot);

eigen[8,4]:=d[1];
eigen[8,2]:=d[2];
{----- I=even, F=J+1}
n0:=2;

a[1,1]:=H(12,j);
a[1,2]:=H(41,j);
a[2,1]:=H(41,j);
a[2,2]:=H(14,j);

jacobi(a,n0,d,v,nrot);

```

```

eigen[7,4]:=d[1];
eigen[7,2]:=d[2];
{----- I=even, F=J}
n0:=3;

a[1,1]:=H(17,j);
a[1,2]:=H(44,j);
a[1,3]:=0;
a[2,1]:=H(44,j);
a[2,2]:=H(19,j);
a[2,3]:=H(46,j);
a[3,1]:=0;
a[3,2]:=H(46,j);
a[3,3]:=H(21,j);

jacobi(a,n0,d,v,nrot);

eigen[6,4]:=d[1];
eigen[6,2]:=d[2];
eigen[6,0]:=d[3];
{----- I=even, F=J-1}
n0:=2;

a[1,1]:=H(23,j);
a[1,2]:=H(48,j);
a[2,1]:=H(48,j);
a[2,2]:=H(25,j);

jacobi(a,n0,d,v,nrot);

eigen[5,4]:=d[1];
eigen[5,2]:=d[2];
{----- I=even, F=J-2}
n0:=2;

a[1,1]:=H(28,j);
a[1,2]:=H(51,j);
a[2,1]:=H(51,j);
a[2,2]:=H(30,j);

jacobi(a,n0,d,v,nrot);

eigen[4,4]:=d[1];
eigen[4,2]:=d[2];
{----- I=even, F=J-3}
eigen[3,4]:=H(32,j);
{----- I=even, F=J-4}
eigen[2,4]:=H(35,j);
{----- print out}

For i0:=1 to 11 DO BEGIN
  FOR j0:=0 to 5 DO BEGIN
    eigen[i0,j0]:=eigen[i0,j0]/2;
  END;
END;

writeln(OutFileVar);
writeln(OutFileVar,'***** Eigen Values *****');
writeln(OutFileVar);
writeln(OutFileVar,'J=          ',j:5:0);
writeln(OutFileVar,'I=odd ,F=J+5 :',eigen[11,5]:14:6);
writeln(OutFileVar,'I=odd ,F=J+4 :',eigen[10,5]:14:6);
writeln(OutFileVar,'I=odd ,F=J+3 :',eigen[ 9,5]:14:6,eigen[9,3]:14:6);
writeln(OutFileVar,'I=odd ,F=J+2 :',eigen[ 8,5]:14:6,eigen[8,3]:14:6);
writeln(OutFileVar,'I=odd ,F=J+1 :',
  eigen[ 7,5]:14:6,eigen[7,3]:14:6,eigen[7,1]:14:6);
writeln(OutFileVar,'I=odd ,F=J :',
  eigen[ 6,5]:14:6,eigen[6,3]:14:6,eigen[6,1]:14:6);
writeln(OutFileVar,'I=odd ,F=J-1 :',
  eigen[ 5,5]:14:6,eigen[5,3]:14:6,eigen[5,1]:14:6);
writeln(OutFileVar,'I=odd ,F=J-2 :',eigen[ 4,5]:14:6,eigen[4,3]:14:6);
writeln(OutFileVar,'I=odd ,F=J-3 :',eigen[ 3,5]:14:6,eigen[3,3]:14:6);
writeln(OutFileVar,'I=odd ,F=J-4 :',eigen[ 2,5]:14:6);
writeln(OutFileVar,'I=odd ,F=J-5 :',eigen[ 1,5]:14:6);
writeln(OutFileVar,'I=even ,F=J+4 :',eigen[10,4]:14:6);
writeln(OutFileVar,'I=even ,F=J+3 :',eigen[ 9,4]:14:6);
writeln(OutFileVar,'I=even ,F=J+2 :',eigen[ 8,4]:14:6,eigen[8,2]:14:6);
writeln(OutFileVar,'I=even ,F=J+1 :',eigen[ 7,4]:14:6,eigen[7,2]:14:6);
writeln(OutFileVar,'I=even ,F=J :',
  eigen[ 6,4]:14:6,eigen[6,2]:14:6,eigen[6,0]:14:6);

```



```

writeln(OutFileVar, 'I=even ,F=J-1 :',eigen[ 5,4]:14:6,eigen[5,2]:14:6);
writeln(OutFileVar, 'I=even ,F=J-2 :',eigen[ 4,4]:14:6,eigen[4,2]:14:6);
writeln(OutFileVar, 'I=even ,F=J-3 :',eigen[ 3,4]:14:6);
writeln(OutFileVar, 'I=even ,F=J-4 :',eigen[ 2,4]:14:6);
END;
(*-----*)
FUNCTION DEnergy(i,j:integer;eQup,eQlow:real;up,low:gleig):real;
BEGIN
  DEnergy:=(eQup-eQlow)*low[i,j];(Eq.by Kroll)
END;
(*-----*)
BEGIN {Main}
(*-----*)
  Assign(OutFileVar,OutFile);
  Rewrite(OutFileVar);

  For i0:=1 to 11 DO BEGIN
    FOR j0:=0 to 5 DO BEGIN
      eup[i0,j0]:=0.0;
      elow[i0,j0]:=0.0;
    END;
  END;

  { EigenValue(Jup, eup); }

  EigenValue(Jlow,elow);

  eQup:=2450-1936.9;
  eQlow:=2450;

  For i0:=1 to 11 DO BEGIN
    FOR j0:=0 to 5 DO BEGIN
      hflne[i0,j0]:=DEnergy(i0,j0,eQup,eQlow,eup,elow);
    END;
  END;

  writeln(OutFileVar);
  writeln(OutFileVar,'***** Frequency of Hyperfine Lines *****');
  writeln(OutFileVar);

  writeln(OutFileVar,'F=J+5, I=5',hflne[11,5]:12:3,' [MHz]');
  writeln(OutFileVar,'F=J+4, I=5',hflne[10,5]:12:3,' [MHz]');
  writeln(OutFileVar,'F=J+3, I=5',hflne[ 9,5]:12:3,' [MHz]');
  writeln(OutFileVar,'F=J+3, I=3',hflne[ 9,3]:12:3,' [MHz]');
  writeln(OutFileVar,'F=J+2, I=5',hflne[ 8,5]:12:3,' [MHz]');
  writeln(OutFileVar,'F=J+2, I=3',hflne[ 8,3]:12:3,' [MHz]');
  writeln(OutFileVar,'F=J+1, I=5',hflne[ 7,5]:12:3,' [MHz]');
  writeln(OutFileVar,'F=J+1, I=3',hflne[ 7,3]:12:3,' [MHz]');
  writeln(OutFileVar,'F=J+1, I=1',hflne[ 7,1]:12:3,' [MHz]');
  writeln(OutFileVar,'F=J , I=5',hflne[ 6,5]:12:3,' [MHz]');
  writeln(OutFileVar,'F=J , I=3',hflne[ 6,3]:12:3,' [MHz]');
  writeln(OutFileVar,'F=J , I=1',hflne[ 6,1]:12:3,' [MHz]');
  writeln(OutFileVar,'F=J-1, I=5',hflne[ 5,1]:12:3,' [MHz]');
  writeln(OutFileVar,'F=J-1, I=3',hflne[ 5,3]:12:3,' [MHz]');
  writeln(OutFileVar,'F=J-1, I=1',hflne[ 5,5]:12:3,' [MHz]');
  writeln(OutFileVar,'F=J-2, I=5',hflne[ 4,5]:12:3,' [MHz]');
  writeln(OutFileVar,'F=J-2, I=3',hflne[ 4,3]:12:3,' [MHz]');
  writeln(OutFileVar,'F=J-3, I=5',hflne[ 3,5]:12:3,' [MHz]');
  writeln(OutFileVar,'F=J-3, I=3',hflne[ 3,3]:12:3,' [MHz]');
  writeln(OutFileVar,'F=J-4, I=5',hflne[ 2,5]:12:3,' [MHz]');
  writeln(OutFileVar,'F=J-5, I=5',hflne[ 1,5]:12:3,' [MHz]');

  writeln(OutFileVar);
  writeln(OutFileVar,'F=J+4, I=4',hflne[10,4]:12:3,' [MHz]');
  writeln(OutFileVar,'F=J+3, I=4',hflne[ 9,4]:12:3,' [MHz]');
  writeln(OutFileVar,'F=J+2, I=4',hflne[ 8,4]:12:3,' [MHz]');
  writeln(OutFileVar,'F=J+2, I=2',hflne[ 8,2]:12:3,' [MHz]');
  writeln(OutFileVar,'F=J+1, I=4',hflne[ 7,4]:12:3,' [MHz]');
  writeln(OutFileVar,'F=J+1, I=2',hflne[ 7,2]:12:3,' [MHz]');
  writeln(OutFileVar,'F=J , I=4',hflne[ 6,4]:12:3,' [MHz]');
  writeln(OutFileVar,'F=J , I=2',hflne[ 6,2]:12:3,' [MHz]');
  writeln(OutFileVar,'F=J , I=0',hflne[ 6,0]:12:3,' [MHz]');
  writeln(OutFileVar,'F=J-1, I=4',hflne[ 5,4]:12:3,' [MHz]');
  writeln(OutFileVar,'F=J-1, I=2',hflne[ 5,2]:12:3,' [MHz]');
  writeln(OutFileVar,'F=J-2, I=4',hflne[ 4,4]:12:3,' [MHz]');
  writeln(OutFileVar,'F=J-2, I=2',hflne[ 4,2]:12:3,' [MHz]');
  writeln(OutFileVar,'F=J-3, I=4',hflne[ 3,4]:12:3,' [MHz]');
  writeln(OutFileVar,'F=J-4, I=4',hflne[ 2,4]:12:3,' [MHz]');

  Close(OutFileVar);

END

```